



TECHNISCHE UNIVERSITÄT ILMENAU

Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
Arbeitsgruppe Numerische Mathematik und
Informationsverarbeitung

Dissertation

Entwurf und Programmierung von numerischen Verfahren und Algorithmen zur Lösung der Boltzmann-Gleichung

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades
Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt von: Muhanad Mahmoud

geboren am: 16.10.1979 in Hama, Syrien

Studiengang: Mathematik

Studienrichtung: Numerische Mathematik

1. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Hans Babovsky

2. Gutachter: Prof. Dr. Sergej Rjasanow

3. Gutachter: Univ.-Prof. Dr. Erich Runge

Tag der Einreichung : 02.12.2016

Tag der wissenschaftlichen Aussprache : 23.06.2017

URN:NBN:DE:GBV:ILM1-2017000273

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben. Insbesondere möchte ich Prof. Dr. Hans Babovsky für die Ermöglichung dieser Arbeit sowie viele hilfreiche Diskussionen und Anmerkungen danken.

Weiterhin danke ich allen, die sich in den letzten Jahren an einer wissenschaftlichen Diskussion mit mir beteiligten, besonders erwähnen möchte ich dabei meine Kollegen Herr Werner Neundorff, Herr Harald Seeber und Herr Stefan Brechtken.

Ein Dankeschön geht an Frau Ute Leithold, die sich um verwaltungstechnische Belange kümmerte.

Mein Dank gilt Frau Barbara Hamann für alles, insbesondere für die deutschsprachige Unterstützung.

Ein besonderer Dank geht an meine zweite Familie (Bernhard und Marlies Heyder), die mich überall unterstützt haben und immer für mich da waren.

Schließlich möchte ich meiner Familien danken [Die kleine Familie (Rabab und Ali) und die große Familie (Vater, Mutter, Muntajab, Sarab, Thanaa, Musab, Solaf, Samara, Samar und Somaiya)], die mich, so lange ich denken kann, bei all meinen Zielsetzungen unterstützt haben.

Ein großes Dankeschön euch allen für die Unterstützung.

Muhanad Mahmoud

Abstract

The Boltzmann equation is a mesoscopic equation which describes gas flows in the transition to particle dynamics. The methods for solving the Boltzmann equation are an important research subject. In this work, we are interested in the so-called deterministic schemata, which are somehow connected with discrete velocity models (DVMs). First the foundations for DVM were put together. Then, for gases with a small Knudsen number, we have proved the convergence to the Maxwell distribution in the general cases. After that, we have basically determined a detailed view of the linearization of the collision operator and the properties of the linearized matrix. Furthermore, we have defined a discretization of the speed range (for 2 and 3 dimensions) and examined some DVMs. In addition, the terms "complete model and complete collision set" have been defined and methods for minimal collision models have been developed. The next logical step is to develop complete collision models, to compare them with each other and some incomplete models, as well as take a closer look at the computational complexity. Then the solution for the Boltzmann equation was investigated in the complex boundary conditions. The algorithms were created to use arbitrary initial values and boundary conditions. These algorithms can store an image for each gas model (spatial space geometry) and then use it in our program. Finally, we have carried out numerical experiments for the Boltzmann equation. The results were compared with those of the physical experiments or with the results of the other numerical methods.

Kurzfassung

Die Boltzmann-Gleichung ist eine mesoskopische Gleichung, welche Gas-Strömungen im Übergang zur Teilchendynamik beschreibt. Die Methoden zur Lösung der Boltzmann Gleichung sind ein wichtiges Forschungsthema.

In dieser Arbeit interessieren wir uns für die sogenannten deterministischen Schemata, die mit diskreten Geschwindigkeitsmodellen (DVMs) verbunden ist.

Zuerst wurden die Grundlagen für DVM zusammengetragen. Dann haben wir für Gase mit kleiner Knudsen-Zahl, in den allgemeinen Fällen, die Konvergenz zu der Maxwell-Verteilung bewiesen. Danach haben wir grundsätzlich eine Detailansicht über die Linearisierung des Stoßoperators und die Eigenschaften der linearisierten Matrix ermittelt. Weiterhin haben wir eine Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums (Für 2- und 3-Dimensionen) definiert und einige DVMs untersucht. Außerdem wurden hier die Begriffe "vollständiges Modell" und "vollständige Stoßmenge" definiert und Methoden, um die minimale vollständige Stoßmodelle zu erstellen, entwickelt. Der logisch nachfolgende Schritt ist verschiedene vollständige Stoßmodelle zu entwickeln, sowie untereinander und mit einigen unvollständigen Modellen zu vergleichen, als auch einen genaueren Blick auf die rechnerische Komplexität zu werfen.

Danach wurde die Lösung der Boltzmann-Gleichung in den komplexen Randbedingungen untersucht. Die Algorithmen wurden dargestellt, um beliebige Anfangswerte und Randbedingungen verwenden. Man kann durch diese Algorithmen jedes Gasmodell (Ortsraum-Geometrie) in einem Bild darstellen/speichern und in unserem Programm verwenden.

Schließlich haben wir numerische Experimente für die Boltzmann-Gleichung durchgeführt. Die Ergebnisse wurden mit denen der physikalischen Experimente und/oder mit den Ergebnissen der anderen numerischen Methoden verglichen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	Die Grundbegriffe der kinetischen Gastheorie	9
2.1	Die Transport-Gleichung	9
2.2	Teilchenstöße	10
2.3	Boltzmann-Kollisionsoperator	13
2.4	Grundlegende Eigenschaften von $J[f, f]$	14
2.4.1	Kollisionsinvarianten	14
2.4.2	Gleichgewichtslösung	15
2.5	Momentengleichung	17
2.5.1	Momente	17
2.6	Randbedingungen	20
2.6.1	Deterministische Reflexionsgesetze	20
2.6.2	Stochastische Reflexionsgesetze	21
3	Die diskretisierte Boltzmann-Gleichung	23
3.1	Diskretisierung im Geschwindigkeitsraum	23
3.1.1	Das Gitter	23
3.1.2	Der Kollisionsoperator	28
3.1.3	Kritische Punkte	30
3.2	Linearisierung	33
4	Ein Geschwindigkeitsmodell und der Stoßoperator	37
4.1	Diskretisierung des \mathbb{R}^2 und Untersuchung des Stoßoperators	38
4.1.1	Vektoren und Rechtecke	39
4.1.2	Algorithmen für Quadrate auf dem Gitter \mathbf{G}_n	51
4.1.3	Algorithmen für Rechtecke auf \mathbf{G}_n	58
4.2	Der Kollisionsoperator in \mathbf{G}_n	61

4.2.1	Die Gleichgewichtslösung	62
4.3	Diskretisierung im \mathbb{R}^3	76
4.3.1	Ein Algorithmus, um alle Quadrate und Rechtecke zu finden	80
4.3.1.1	Die Rechtecke	84
4.3.1.2	Die Quadrate	85
5	Die Boltzmann-Gleichung in den komplexen Randbedingungen	89
5.1	Numerisches Verfahren	90
5.2	Installation eines Modells in einer Matrix	90
5.2.1	Hauptmatrix	91
5.2.2	Allgemeine Modelle	99
5.2.3	Membran-Punkte (Membran-Linie)	100
5.3	Die Diskretisierung der Transport-Gleichung	109
5.4	Diskretisierung der Randbedingungen	114
5.4.1	Randbedingungen-Strategie	115
5.5	Die makroskopischen Eingangsgrößen	121
6	Numerische Experimente	127
6.1	Das Relaxationsproblem	127
6.2	Quadratisches Stoß-Modell vs. Freier Fluss	129
6.2.1	Gas im Quadrat	129
6.3	Quantitative Ergebnisse	131
6.3.1	Wärmeﬂuss zwischen zwei Platten (Quadratische und rechteckige Stoßmodelle vs. DSMC)	131
6.4	Qualitative Ergebnisse	137
6.4.1	Das Shocktubeproblem.	137
6.4.2	Thermische Kriechströmung	138
6.4.3	Schockfront in einem Kanal	142
	Literaturverzeichnis	149

1 Einführung

Die Boltzmann-Gleichung spielt eine große Rolle bei der Simulation von Strömungen verdünnter Gase. Sie ist eine Gleichung für die statistische Verteilung von Teilchen in einem Medium und besteht aus zwei Teilen: Transport- und Stoßteil. Der Transportteil ist ein Differenzialterm und der Stoßteil ist ein Integral. D.h., die Boltzmann-Gleichung ist eine Integro-Differentialgleichung.

Die Dichtefunktion $f(t, x, v)$ eines verdünnten Gases im Phasenraum entwickelt sich nach der Boltzmann-Gleichung. In dem physikalisch relevanten Fall wird das Gas durch $f(t, x, v) : \mathbb{R}^+ \times \Omega \times \mathbb{R}^{d'} \rightarrow \mathbb{R}^+$ beschrieben, wobei t die Zeit, $x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ eine Position im Raum, v die Geschwindigkeit, und $d \leq d' \leq 3$ ist. Von einem verdünnten Gas nehmen wir an, dass die Partikel miteinander im Wesentlichen nur durch paarweise Wechselwirkungen interagieren. Aus dieser Hypothese folgt die Ableitung der Boltzmann-Gleichung (siehe [47])

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f(t, x, v) = J[f, f](t, x, v). \quad (1.1)$$

Die linke Seite beschreibt die Entwicklung der Dichte durch den freien Fluss der Moleküle und die rechte Seite beschreibt den Stoßoperator, dabei gilt

$$J[f, f](v) = \int_{\mathbb{R}^{d'}} \int_{S^{d'-1}} k(v - w, \eta) \cdot [f(v')f(w') - f(v) - f(w)] d\eta dw. \quad (1.2)$$

Hier ist η ein Einheitsvektor und $k(\cdot, \cdot)$ der Kern des Kollisionsoperators. $k(\cdot, \cdot)$ ist nicht negativ und erfüllt einige Symmetrie-Eigenschaften. Die nach dem Stoß entstandenen Geschwindigkeiten v' und w' ergeben sich aus den vor dem Stoß bestehenden Geschwindigkeiten v und w . Aus der Erfüllung der Erhaltungssätze,

$$\begin{aligned} \text{Erhaltung des Impulses :} & \quad v' + w' = v + w \\ \text{Erhaltung der kinetischen Energie} & \quad \frac{1}{2} |v'|^2 + \frac{1}{2} |w'|^2 = \frac{1}{2} |v|^2 + \frac{1}{2} |w|^2 \end{aligned}$$

ergibt sich Folgendes:

$$\begin{aligned} v' &= \frac{v+w}{2} + \frac{|v-w|}{2}\eta, \\ w' &= \frac{v+w}{2} - \frac{|v-w|}{2}\eta. \end{aligned} \tag{1.3}$$

Weitere Details sind im nächsten Kapitel beschrieben.

Viele Forscher haben Untersuchungen durchgeführt, um die Lösung der Boltzmann-Gleichung zu finden. Zum Beispiel wurden in [67], [32], [8], [19], [15], [61], [24] die homogene Boltzmann-Gleichung für einige besondere Fälle betrachtet, um Untersuchungen über die allgemeine Lösung von 1.1 anzustellen. In diesen besonderen Fällen gibt es einige Informationen über die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung der Boltzmann-Gleichung. Gegenstand unserer Untersuchungen sind numerische Simulationstechniken für die Boltzmann-Gleichung.

Die meisten numerischen Berechnungen der Boltzmann-Gleichung basieren auf probabilistischen Monte-Carlo-Techniken auf verschiedenen Ebenen. In der MC-Methode wird die Dichtefunktion durch ein N – Punkte-System oder (N – Partikel-System) approximiert. Die direkte Simulation in der Monte-Carlo-Methode (DSMC) von Bird [12] und die modifizierte Monte-Carlo-Methode von Nanbu [42] sind Beispiele dieser MC-Methode. In [33], [47], [5], [45], [12] sind viele detaillierte Beschreibungen dieser Methoden nachzulesen.

In den probabilistischen Verfahren ist der rechnerische Aufwand stark reduziert und abhängig von der Anzahl der Punkte N . Die DSMC Methoden sind mathematisch gut nachvollziehbar (siehe [7], [43], [60], [25], [6]) und wurden mit gutem Erfolg in vielen Fällen verwendet. Für die stochastischen Verfahren ist der Fehler $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$. DSMC leidet aufgrund der niedrigen Genauigkeit, welche zu fluktuierenden Ergebnissen im Vergleich mit Finite-Differenzen-Verfahren oder Finite-Volumen-Verfahren führt. Jedoch wird für die Kopplung der Boltzmann-Gleichung und der Fluid-dynamischen Domänen eine hohe Genauigkeit benötigt. Außerdem ist das DSMC Verfahren noch nicht gut anwendbar für die Berechnung des stationären Flusses. Im Gegensatz zu den stochastischen Ansätzen ermöglichen die deterministischen Methoden prinzipiell eine Fehlerabschätzung. Mit den deterministischen Methoden kann man viele Fluktuationen ausschalten, und sehr feine Effekte messen, die normalerweise bei den DSMC Methoden im Rauschen verschwinden. D.h., dass die deterministischen Methoden sehr gute Alternativen für DSMC Methoden sind.

Die Arbeiten [23], [46], [29], [44], [3] enthalten Vorschläge für die deterministischen Berechnungsansätze, um Schwankungen, die bei der DSMC-Methode auftreten können, zu vermeiden. Jedoch gelten diese Arbeiten nur für den Fall der linearisierten Boltzmann-Gleichung oder für einige besondere Modelle.

Es gibt auch hybride Schemata zwischen den probabilistischen und den deterministischen Schemata, in denen die Zufälligkeit frei gewählt werden kann (siehe [64]). Die Arbeiten, die die Entwicklung in stochastischen Teilchen-Methoden führen, sind ([51], [65] und [66]).

Die diskreten Geschwindigkeitsmodelle (discrete velocity models *DVM*) sind ein deterministisches Verfahren, bei dem die Geschwindigkeiten der Moleküle, die auf eine endliche Menge beschränkt sind, verwendet werden.

Einführung in das Thema Diskrete Geschwindigkeitsmodelle: Das erste Beispiel eines diskreten Geschwindigkeitsmodells ist das von Carleman (siehe [20], 1957). Es ist ein eindimensionales Modell, welches zwei Geschwindigkeiten $v_1 = +1$, $v_{-1} = -1$ hat. Die kinetische Gleichungen sind:

$$\begin{aligned} (\partial_t + \partial_x) f_{+1}(t, x) &= f_{-1}^2(t, x) - f_{+1}^2(t, x), \\ (\partial_t - \partial_x) f_{-1}(t, x) &= f_{+1}^2(t, x) - f_{-1}^2(t, x). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Das Carleman-Modell ist kein physikalisch brauchbares Modell, weil es weder die Energieerhaltung noch die Impulserhaltung einbezieht. Es berücksichtigt nur die Massenerhaltung.

Das Broadwell-Modell (siehe [17], [16]) ist kein physikalisch realistisches Modell. Es wird mit vier Geschwindigkeiten:

$$\{v_{+1} = (+1, 0), v_{-1} = (-1, 0), v_{+2} = (0, +1), v_{-2} = (0, -1)\}$$

und den kinetischen Gleichungen

$$\begin{aligned} (\partial_t \pm \partial_x) f_{\pm 1}(t, x) &= f_{-2}(t, x) \cdot f_{+2}(t, x) - f_{-1}(t, x) \cdot f_{+1}(t, x), \\ (\partial_t \pm \partial_y) f_{\pm 2}(t, x) &= f_{-1}(t, x) \cdot f_{+1}(t, x) - f_{-2}(t, x) \cdot f_{+2}(t, x) \end{aligned} \quad (1.5)$$

beschrieben. Das Broadwell-Modell ist wie Carleman-Modell kein physikalisch brauchbares Modell, weil es nur zwei-Erhaltungsgrößen hat.

Bei diesem Modell gilt: Energie = $\frac{1}{2}$ Masse.

In den vergangenen Jahrzehnten wurde eine kinetische Theorie auf DVM-Basis entwickelt. Die Resultate sind z.B. in den Arbeiten von Gatignol [28] und von Platkowski und Illner [34] zu finden. In [13], [14], [52] kann man Ergebnisse über Stabilität, Konsistenz und Konvergenz der DVM sehen. In [48] haben Junk und Rao neue DVM, die auf kinetischen Verfahren basieren, vorgestellt. Es wurden viele Modelle vorgeschlagen, und es gibt umfangreiche Literatur darüber, wie man physikalisch realistische Modelle konstruieren und analysieren, die sowohl die richtigen Erhaltungssätze als auch das

Entropie-Prinzip erfüllen, z.B. Bobolev und andere in [13], [14], [21], und [62] und von anderen Forscher in [18], [53], [30], [54], [56], [55]. Hier werden verschiedene Methoden dargestellt, die auf einem regelmäßigen Gitter im Geschwindigkeitsfeld basieren. In einem diskreten Geschwindigkeitsmodell (DVM) sind die Geschwindigkeiten auf eine endliche Menge $G_d = \{v_k, k \in \{1, \dots, n\}\} \subset \mathbb{R}^d$ beschränkt. Dabei wird die Boltzmann-Gleichung zu der diskreten Boltzmann-Gleichung umgewandelt. Das bedeutet:

$$(\partial_t + v_i \nabla_x) f_i(t, x) = J[f_i, f_i] = \sum_{j,k,l} \Gamma_{i,j}^{k,l} [f_k f_l - f_i f_j], \quad (1.6)$$

mit $i, j, k, l \in \{1, \dots, n\}$, $f(t, x, v_i) = f_i(t, x)$ und $\Gamma_{i,j}^{k,l} \geq 0$. Hierbei bleiben Impuls und Energie erhalten:

$$\sum_{e=1}^n \begin{pmatrix} 1 \\ v_e \\ \frac{1}{2} \|v_e\|^2 \end{pmatrix} \cdot f_e = \text{const.}$$

Daraus folgt:

$$v_k + v_l = v_i + v_j, \quad \frac{1}{2} v_k^2 + \frac{1}{2} v_l^2 = \frac{1}{2} v_i^2 + \frac{1}{2} v_j^2,$$

sowie $\forall i, j, k, l \in \{1, \dots, n\}$:

$$v_k + v_l \neq v_i + v_j \quad \text{oder} \quad \frac{1}{2} v_k^2 + \frac{1}{2} v_l^2 \neq \frac{1}{2} v_i^2 + \frac{1}{2} v_j^2 \Rightarrow \Gamma_{i,j}^{k,l} = 0.$$

Hier bezeichnet $\Gamma_{i,j}^{k,l}$ die Wahrscheinlichkeit für die Kollision, $(i, j) \rightarrow (k, l)$. $\Gamma_{i,j}^{k,l}$ erfüllt einige Symmetrie-Eigenschaften, z.B. $\Gamma_{i,j}^{k,l} = \Gamma_{k,l}^{i,j}$. Dann besitzt die Lösung des Systems 1.6 die kinetischen Eigenschaften wie Erhaltungssätze und das H-Theorem [28], wobei die H-Funktion definiert ist als

$$H[f] := \sum_{v \in G_d} f(v) \cdot \ln[f(v)]. \quad (1.7)$$

Babovsky und Andallah (siehe [9], [2], [1]) haben das Geschwindigkeitsfeld in Hexagons zerlegt und die Stöße, die auf dem Hexagon wirken, betrachtet. Bei den Hexagonmodellen entstehen künstliche Invarianten, die ohne physikalische Bedeutung sind. Um jedoch diese künstlichen Invarianten zu vermeiden, wird ternären Stoßoperator J_{ter} benutzt.

Fainsilber und andere (siehe [26], [27]) haben bewiesen, dass der diskretisierte Stoßoperator in zweidimensionalen Geschwindigkeitsraum gegen den Stoßoperator im Konti-

nuum konvergiert. Dafür benutzten sie die Zahlentheorie, um alle Stöße zu betrachten. Dafür haben sie alle möglichen Punkte, die auf einem Kreis liegen, betrachtet, um den Stoßoperator zu approximieren. Jedoch gibt es dafür keinen schnellen Algorithmus, um alle Stoßpartner zu ermitteln, die auf einem Kreis liegen. In unserer Arbeit (Drittes Kapitel) habe ich bewiesen, dass es nicht notwendig ist, alle Stoßpartner zu betrachten, damit die Lösung der Boltzmann-Gleichung zur Maxwell-Verteilung

$$M(t, x, v) = \frac{\rho(t, x)}{\left(\sqrt{2\pi T(t, x)}\right)^d} \exp \left[-\frac{(v - \bar{v}(t, x))^2}{2T(t, x)} \right] \quad (1.8)$$

konvergiert, da wir ein minimales Stoß-Modell gefunden haben. Außerdem haben wir die Eigenschaften der Modelle, die nicht vollständig sind, betrachtet (in \mathbb{R}^2 und in \mathbb{R}^3).

Numerische Methode:

Die **Operator-Splitting-Methode** wird hier verwendet, um die Boltzmann-Gleichung in zwei Gleichungen, die parallel zu einander gelöst werden, zu splitten. In [41] findet man eine Darstellung der Anwendung dieser Methode zum Splitten der Boltzmann-Gleichung 1.6.

Für den Zeitschritt $n + 1$ finden wir die numerische Lösung der Transportgleichung im Folgenden:

$$(\partial_t + v \nabla_x) h(t, x, v) = 0$$

mit der Anfangsbedingung: $h(0, x, v) = f(n \cdot \Delta t, x, v)$,

wobei Δt der Zeitschritt ist. Danach betrachten wir die numerische Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung:

$$\partial_t g(t, x, v) = J[g, g](t, x, v)$$

mit der Anfangsbedingung: $g(0, x, v) = h(\Delta t, x, v)$.

Dann ist eine Approximierung der Boltzmann-Gleichung zum Zeitschritt $n + 1$:

$$f((n + 1) \cdot \Delta t, x, v) = g(\Delta t, x, v).$$

Skizze des Beitrags

Kapitel 2:

Wir präsentieren eine kurze Diskussion über die Herleitung der Boltzmann-Gleichung und die grundlegenden Eigenschaften des Boltzmann-Stoßoperators, sowie über die Formulierung von Randbedingungen.

Kapitel 3:

In diesem Kapitel haben wir die Grundlagen für DVM zusammengetragen, dann haben wir für Gase mit kleiner Knudsen-Zahl in den allgemeinen Fällen (unabhängig vom Grad des Geschwindigkeitsraums) die Konvergenz zu der Maxwell-Verteilung bewiesen. Weiterhin haben wir grundsätzlich eine Detailansicht über die Linearisierung des Stoßoperators und die Eigenschaften der linearisierten Matrix gefunden.

Kapitel 4

In diesem Kapitel haben wir eine Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums $(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^3)$ definiert und einige DVMs untersucht.

Zuerst haben wir mit \mathbb{R}^2 gearbeitet, das Gitter G_n , $n > 1$ definiert und jedes Rechteck, das Eckpunkte aus G_n besitzt, mit einem Vektor aus $\{-1, 0, +1\}^{n^2}$ durch eine Funktion g verbunden. Dann haben wir nach einer Rechteckbasis gesucht und bewiesen, dass für jedes Stoß-Modell, das eine Rechteckbasis beinhaltet, die Stoß-Invarianten $\text{span}\{1, v_x, v_y, v^2\}$ lauten. Darauf folgt die Definition des Komplet-Stoßmodells (vollständige Stoßmenge), dessen Grad $n^2 - 4$, und des Nichtkomplet-Stoßmodells, deren Grad kleiner als $n^2 - 4$ ist. Die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung konvergiert für die beide Stoß-Modelle zu einer Gleichgewichtsstelle. Die Gleichgewichtsfunktion für Komplet-Stoßmodell ist die Maxwell-Verteilung, für die Nichtkomplet-Stoßmodelle gilt diese nicht, was schon für beide Fälle bewiesen wurde. Außerdem haben wir einige Nichtkomplet-Stoßmodelle untersucht und ihre Gleichgewichtsstelle bestimmt. Darüber hinaus haben wir einen Algorithmus gefunden, der alle Quadrate in G_n finden kann, und eine Theorie für die Anzahl der Quadrate und für die der Rechtecke aufstellt.

Wir haben eine ähnliche Theorie für \mathbb{R}^3 verfasst diese für die Menge der Rechtecke, deren Ebene parallel zu einer Achsenebene ist, als Komplet-Stoßmodelle betrachtet. Die Algorithmen um alle Rechtecke und alle Quadrate zu bestimmen, haben wir in diesem Teil außerdem dargestellt.

Kapitel 5

In diesem Kapitel haben wir die Lösung des Transportteiles der Boltzmann-Gleichung, insbesondere im $2 - dim.$ Ortsraum untersucht. Wir haben die Algorithmen dargestellt, um beliebige Anfangswerte und Randbedingungen verwenden. Wir können durch diese Algorithmen jedes Gasmodell (Ortsraum-Geometrie) in einem Bild speichern und danach das Modell in unserem Programm verwenden. So können wir die Möglichkeiten der Grafik-Programme (z.B Paint, Matlab, ...) nutzen, um unser Gasmodell zu zeichnen.

In diesem Teil haben wir weiterhin Methoden beschrieben, mit denen die makroskopischen Größen des Modelles berechnet werden können.

Kapitel 6

Hier haben wir numerische Experimente für die Boltzmann-Gleichung durchgeführt, die vom Quadrat-Stoßoperator abhängt. Die Ergebnisse wurden mit denen der physikalischen Experimente oder mit den Ergebnissen der anderen numerische Methoden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung verglichen. Zuerst haben wir die homogene Boltzmann-Gleichung betrachtet und als typisches Beispiel das Relaxationsproblem. Darauf folgen die eindimensionalen Probleme und klassischen Beispiele (Wärmefluss zwischen zwei Platten und das Shocktubeproblem). Es folgen die zweidimensionalen Probleme, bei denen haben wir die Ergebnisse der komplexen Ränder, die im letzten Kapitel behandelt wurden, verwendet. Somit betrachten wir in diesem Experiment die verschiedenen Arten von Randbedingungen, die im vorangegangenen Kapitel dargestellt wurden.

2 Die Grundbegriffe der kinetischen Gastheorie

Die Boltzmann-Gleichung, ein prominenter Repräsentant der kinetischen Gleichungen, beschreibt die Entwicklung der verdünnten Gase. Die Dynamik der Boltzmann-Gleichung ist durch einen Freie-Flussschritt und einen Partikel-Kollisionsschritt mit der Erhaltung des Impulses und der Energie gegeben. Der freie Flussschritt wird durch die Transport-Gleichung modelliert. Der Kollisionsschritt wird durch den Boltzmann-Kollision Operator beschrieben. Unsere Präsentation wird hauptsächlich auf (Babovsky, [4]) basieren. Die grundlegenden Eigenschaften des Boltzmann Kollision Operators und die Randbedingungen der Boltzmann-Gleichung werden ebenfalls diskutiert.

2.1 Die Transport-Gleichung

Ein Gas (mit Dichteverteilung $f(t, x, v)$) in ruhigen Zustand wird ohne Kraftfelder betrachtet.

$$\begin{aligned}
 \text{ruhiger Zustand} &\Leftrightarrow \frac{df(t, x, v)}{dt} = 0 \Rightarrow \\
 \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial x}{\partial t} \cdot \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x}}_{=v} + \underbrace{\frac{\partial v}{\partial t} \cdot \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x}}_{\text{ohne Kraftfelder} \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial t}=0} &= 0 \Rightarrow \\
 \partial_t f + v \cdot \nabla_x f &= 0. \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

Die Gleichung 2.1 nennen wir die Transport-Gleichung.

Bemerkung: Die Transport-Gleichung enthält nur den Transport-Term der Boltzmann-Gleichung, weil sie nur Gas im Ruhezustand betrachtet. Die Idee der Boltzmann-Gleichung lautet, dass einige Teilchen mit Geschwindigkeit v mit anderen Teilchen mit anderen Geschwindigkeiten zusammenstoßen. Danach fliegen sie mit neuen Geschwindigkeiten. Gleichzeitig werden andere Teilchen ihre Geschwindigkeiten zu v än-

dern. Durch das Hinzufügen des Boltzmann-Kollisionsoperators $J[f, f]$ zur Transport-Gleichung (in Abwesenheit des äußeren Kraftfelds) erhalten wir die Boltzmann-Gleichung in der Form

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = J[f, f]. \quad (2.2)$$

Der Kollisionsoperator $J[f, f]$ besteht aus einem Verlust- und Gewinnterm.

2.2 Teilchenstöße

Wir betrachten hier nur Stöße, welche der Erhaltung der Masse, der kinetischen Energie und des Impulses genügen. Bevor wir uns tief mit diesem Thema beschäftigen, möchten wir mit folgenden Lemmata auf einige Eigenschaften von Rechtecken (Die Seitenlängen dürfen Null sein) blicken.

Lemma 2.2.1. 1. Seien $a, b, c, d \in \mathbb{R}^3$ dann: Das Viereck $abcd$ ist Rechteck genau dann, wenn

$$a + c = b + d, \quad a^2 + c^2 = b^2 + d^2, \quad (2.3)$$

mit den Abkürzungen $a \equiv \overrightarrow{Oa}$, $b \equiv \overrightarrow{Ob}$, $c \equiv \overrightarrow{Oc}$, $d \equiv \overrightarrow{Od}$, wobei O der Ursprungspunkt ist.

2. Die Menge aller Rechtecke, die \overline{ac} als Diagonale besitzen, ist:

$$\{r = abcd : (b, c) \in D_{a,c}\},$$

wobei

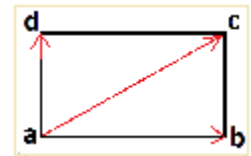
$$D_{a,c} = \left\{ \left(\frac{a+c}{2} + \frac{\|c-a\|}{2} \eta, \frac{a+c}{2} - \frac{\|c-a\|}{2} \eta \right) : \eta \in S^2 \right\},$$

und S^2 die Menge aller Einheitsvektoren in \mathbb{R}^3 sind.

Beweis:

1. Zuerst möchten wir beweisen, dass $abcd$ ein Parallelogramm ist.

$$\begin{aligned} a + c = b + d &\Leftrightarrow \\ \underbrace{(c-a)}_{\overrightarrow{ac}} &= \underbrace{(b-a)}_{\overrightarrow{ab}} + \underbrace{(d-a)}_{\overrightarrow{ad}} \Leftrightarrow abcd \text{ ist Parallelogramm.} \end{aligned}$$



Hier möchten wir beweisen, dass das Parallelogramm $abcd$ einen rechten Winkel hat:

$$\begin{aligned}
 (\vec{ab})^2 + (\vec{ad})^2 &= (b-a)^2 + (d-a)^2 = \\
 &= \underbrace{b^2 + d^2}_{=a^2+c^2 \text{ (Aus 2.3)}} + 2a^2 - 2a \cdot \underbrace{(b+d)}_{=a+c \text{ (Aus 2.3)}} = a^2 + c^2 - 2ac = (c-a)^2 = (\vec{ac})^2 \\
 &\Leftrightarrow [\text{Das Parallelogramm } abcd \text{ ist Rechteck}].
 \end{aligned}$$

2. Es gilt, dass der Umkreis K des Rechtecks $abcd$ den Punkt $o = \frac{a+c}{2}$ als Mittelpunkt und $r = \frac{\|c-a\|}{2}$ als Radius hat, und \overline{bd} Durchmesser von K ist. \square

Stoß zweier gleicher Teilchen: Seien die Teilchen T_1, T_2 mit den Massen $m_1 = m_2 = m = 1$ und mit gleichen Radius R , welche mit Geschwindigkeiten v, w zusammenstoßen und mit neuen v', w' auseinander fliegen.

$$(v, w) \rightarrow (v', w').$$

Wegen der Impulserhaltung gilt:

$$v + w = v' + w', \quad (2.4)$$

und wegen der Energieerhaltung:

$$v^2 + w^2 = v'^2 + w'^2. \quad (2.5)$$

Hinweis 2.2.2. Seien zwei Geschwindigkeitspaare (v, w) und (v', w') , für welche die Gleichungen 2.4 und 2.5 gelten, gegeben. Dann folgt aus Lemma 2.2.1, dass das Viereck $vv'ww'$ ein Rechteck ist und außerdem $\exists \eta \in S^2$:

$$\begin{aligned}
 v' &= \frac{v+w}{2} + \frac{|w-v|}{2} \cdot \eta \\
 w' &= \frac{v+w}{2} - \frac{|w-v|}{2} \cdot \eta,
 \end{aligned} \quad (2.6)$$

wobei die Einheitskugel in \mathbb{R}^3 S^2 ist. D.h., dass das Viereck $vv'ww'$ ein Rechteck ist.

Definition 2.2.3. Für alle $\eta \in S^2$ definieren wir die Funktion $T_\eta : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$

folgendermaßen:

$$T_\eta(u, v) = \begin{pmatrix} c_{u,v} + r_{u,v} \cdot \eta \\ c_{u,v} - r_{u,v} \cdot \eta \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

mit $c_{u,v} = \frac{u+v}{2}$, $r_{u,v} = \frac{\|u-v\|}{2}$.

Lemma 2.2.4. a) Zwei Geschwindigkeitspaare (v, w) und (v', w') , für welche die Gleichungen 2.4 und 2.5 gelten, stehen miteinander in der Beziehung

$$\exists \eta \in S^2 : \begin{pmatrix} v' \\ w' \end{pmatrix} = T_\eta(v, w). \quad (2.8)$$

b) $T_\eta(v, w)$ ist bezüglich (v, w) differenzierbar und außerdem gilt für die Funktionaldeterminante:

$$\left| \frac{\partial(v, w)}{\partial(v', w')} \right| = 1, \quad (2.9)$$

und

$$d^3 v' d^3 w' = d^3 v d^3 w. \quad (2.10)$$

c) Es gilt die Gleichung

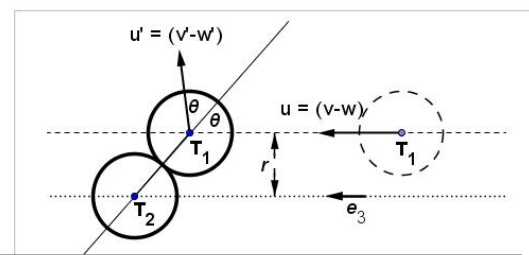
$$|v - w| = |v' - w'|. \quad (2.11)$$

Beweis: (Siehe [4] (Seite 22))

Der Stoßparameter: Seien T_1, T_2 zwei Teilchen mit gleichem Radius R und den Geschwindigkeiten v, w . Wir möchten einige Parameter untersuchen, die eine Rolle bei v', w' bzw. beim Auswählen von η spielen. Wir wählen nun ein neues Koordinatensystem, sodass T_2 in dem Zentrum des Systems festgestellt und T_1 mit der Geschwindigkeit $u = v - w$ (in Richtung des kanonischen Einheitsvektors e_z) fliegt. Sei r der Abstand zwischen dem Teilchen T_1 und der Z -Achse. Das Teilchen T_1 nähert sich auf der Bahn $t \rightarrow (r \cos(\phi), r \sin(\phi), t \cdot |u|)^T$ und wird mit T_2 zusammenstoßen falls $r < 2 \cdot R$, es fliegt mit neuer Geschwindigkeit $u' = T_\eta u$ mit einem Einheitsvektor $\eta = (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta))^T$, $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}[$, $\phi \in [0, 2\pi]$. Hierbei ist θ abhängig von dem **Stoßparameter** \underline{r} und der **Auftreffgeschwindigkeit** $|v - w|$:

$$\theta = \theta(r, |v - w|). \quad (2.12)$$

Zum Beispiel betrachten wir das Hartkugelgas, wie man in der Abbildung 2.1



sieht, wobei der Einfallswinkel und der Ausfallswinkel identisch sind.

2.3 Boltzmann-Kollisionsoperator

Wir haben oben gesagt, dass die Transport-Gleichung mit Boltzmann-Kollisionsoperator $J[f, f]$ ergänzt wird. Andererseits besteht $J[f, f]$ aus einem Verlustterm $J^-[f, f]$ und einem Gewinnterm $J^+[f, f]$. Die genaue Herleitung von $J[f, f]$ ist im [6] beschrieben.

Der Verlustterm $J^-[f, f]$: Was verursacht diesen Term und welche Parameter spielen bei seiner Formulierung eine Rolle?

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen T_1 mit der Geschwindigkeit v innerhalb eines Intervalles Δt auf ein Teilchen T_2 mit der Geschwindigkeit w trifft und beide Teilchen somit gestreut werden. Diese Wahrscheinlichkeit ist nichts anderes als die Wahrscheinlichkeit, dass der Mittelpunkt x_2 von T_2 in dem Stoßzylinder

$$Z_{\Delta t} = \left\{ x : \inf_{t \in [0, \Delta t]} |x - (x_1 + t(v - w))| < 2R \right\} \quad (2.13)$$

liegt, wobei T_1, T_2 den gleichen Radius R haben. $Z_{\Delta t}$ hat das Volumen

$$Vol_{\Delta t} = 4\pi R^2 |v - w| \Delta t. \quad (2.14)$$

Sei N die Teilchenanzahl in einem Volumenelement und

$$\lim_{N \rightarrow \infty, R \rightarrow 0} (N \cdot R^2) = const < \infty.$$

Dann ist die Wahrscheinlichkeit eines Teilchens, mit der Geschwindigkeit v innerhalb Δt auf ein solches mit Geschwindigkeit w zu treffen, gleich

$$\sigma \cdot (Vol_{\Delta t}) \cdot f(w) = 4\sigma\pi R^2 \cdot N \cdot |v - w| \cdot f(w) \cdot \Delta t, \quad (2.15)$$

mit einem geeigneten Proportionalitätsfaktor σ . Das führt dazu, dass die Transport-Gleichung einen Verlustterm der Form

$$- \sigma_0 \cdot |v - w| \cdot f(v) f(w) \quad (2.16)$$

hat, mit $\sigma_0 = 4\sigma \cdot \pi \cdot N \cdot R^2$. Um den Gewinnterm zu ermitteln, untersuchen wir für kleine Volumenelemente ΔV das Integral

$$P_{v'}(\Delta V) := \sigma_0 \int_{w' \in \mathbb{R}^d} \int_{\eta \in S_+^2 : T_\eta^{(1)}(v', w') \in \Delta V} r_0(\theta) \frac{dr_0}{d\theta} d\theta d\phi |v' - w'| f(w') dw' \quad (2.17)$$

als den von v' nach ΔV gestreuten Teilchenanteil. Durch die Involutionseigenschaft von T_η und die Maßtreue der Abbildung $(v', w') \rightarrow (v, w)$ gilt

$$\int_{\mathbb{R}^d} P_{v'}(\Delta V) f(v') dv' \approx \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_+^2} k(|v - w|, \theta) \cdot f(v') \cdot f(w') d\omega(\eta) dw \quad (2.18)$$

mit

$$k(|v - w|, \theta) = 4|v - w| \frac{r_0(\theta)}{\sin(\theta)} \frac{dr_0}{d\theta} \quad (2.19)$$

und

$$d\omega(\eta) = \frac{1}{4\pi} \sin(\theta) d\theta d\phi. \quad (2.20)$$

Der Boltzmann-Kollisionsoperator ist die Summe von Verlustterm und Gewinnterm:

$$J[f, f](v) = \sigma_0 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_+^2} k(|v - w|, \theta) \cdot [f(v') \cdot f(w') - f(v) \cdot f(w)] d\eta dw, \quad (2.21)$$

wobei θ der Winkel zwischen $v - w$ und η ist; S_+^{d-1} ist die Menge der Einheitsvektoren $\eta \in S^{d-1}$ für die $\langle \eta, v' \rangle > 0$ gilt.

$$J[f, f](v) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{S^2} \hat{k}(|v - w|, \theta) \cdot [f(v') \cdot f(w') - f(v) \cdot f(w)] d\eta dw \quad (2.22)$$

also mit $\hat{k}(|v - w|, \theta) = \frac{\sigma_0}{2} k(|v - w|, \theta)$.

2.4 Grundlegende Eigenschaften von $J[f, f]$

Wir diskutieren hier die grundlegenden Eigenschaften von $J[f, f]$.

2.4.1 Kollisionsinvarianten

Definition 2.4.1. *Kollisionsinvarianten:* eine lokal-integrierbare Funktion $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ heißt Kollisionsinvariante der Boltzmann-Gleichung mit Kollisionsope-

rator $J(\cdot, \cdot)$ falls für jede Funktion $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, für die $\phi \cdot f$ integrierbar ist, gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \phi(v) J(f, f)(v) dv = 0 \quad (2.23)$$

Ein notwendiges Kriterium für Kollisionsinvarianten ist folgendes.

Lemma 2.4.2. *Eine lokal integrierbare Funktion ϕ ist Kollisionsvariante, falls für beliebige $v, w \in \mathbb{R}^d$ und beliebige Einheitsvektoren $\eta \in \mathbb{R}^d$ mit $(v', u')^T = T_\eta(u, v)$ folgendes gilt:*

$$\phi(v) + \phi(w) = \phi(v') + \phi(w'). \quad (2.24)$$

Beweis: (Siehe [4] (Seite 47))

Definition 2.4.3. *(Kollisionsinvariante): Wir nennen eine Kollisionsinvariante ϕ eine Basis-Kollisionsinvariante, falls für beliebige $v, w \in \mathbb{R}^d$ und beliebige Einheitsvektoren $\eta \in S^{d-1}$ gilt*

$$\phi(v) + \phi(w) = \phi(v') + \phi(w'). \quad (2.25)$$

Aus der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung bei Stößen folgt, dass die Funktionen $\phi_0(v) := 1(\text{Masse})$, $\phi_i(v) := v_i$, $i = 1, \dots, d$ (Impuls), und $\phi_{d+1}(v) := \frac{1}{2} \|v\|^2$ (kinetische Energie) Kollisionsinvarianten sind. Der folgende Satz zeigt außerdem, dass diese die einzigen Kollisionsinvarianten mit gewissen Regularitätseigenschaften sind.

Lemma 2.4.4. *Eine stetige Funktion $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ist **Basis-Kollisionsinvariante** genau dann, wenn*

$$\phi(v) = a + \langle b, v \rangle + c \|v\|^2 \quad (2.26)$$

mit $a, c \in \mathbb{R}$ und $b \in \mathbb{R}^d$.

Beweis: (Siehe [4] (Seite 50))

2.4.2 Gleichgewichtslösung

Wenn die homogene Boltzmann-Gleichung

$$\partial_t f^{(t)}(v) = J[f^{(t)}, f^{(t)}](v) \quad (2.27)$$

mit dem Anfangswert $f^{(0)}(v) = f_0(v)$ betrachtet wird, existiert der Grenzwert $\lim_{t \rightarrow \infty} f^{(t)}(v) =: f^\infty(v)$. Das ergibt, dass

$$J[f^\infty, f^\infty] \equiv 0.$$

Ziel dieses Abschnittes ist die Untersuchung der Konvergenz der Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung und die Herleitung von Funktionen $\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^+$, für die gilt $J[f, f] \equiv 0$.

Definition 2.4.5. Eine Funktion $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ und $f \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d)$ mit den Eigenschaften

- $f(v) > 0$ für alle $v \in \mathbb{R}^d$
- $\ln(f) \cdot J(f, f) \in L^1(\mathbb{R}^d)$

heißt **Gleichgewichtslösung** der Boltzmann Gleichung, falls $J(f, f) \equiv 0$.

Definition 2.4.6. Sei die dichte Funktion $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ und $f \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d)$ und mit der Eigenschaft $f(v) > 0$ für alle $v \in \mathbb{R}^d$. Die Funktion

$$H[f] := \int_{\mathbb{R}^d} f(v) \cdot \ln(f(v)) \, dv \quad (2.28)$$

wird *H-Funktion* genannt.

Im folgenden Satz betrachten wir die homogene Boltzmann-Gleichung

$$\partial_t f(v) = J[f, f](v). \quad (2.29)$$

Lemma 2.4.7. H-Theorem: Ist der Stoßkern $k(|v - w|, \eta) > 0$ fast überall, so gilt

1. Für Lösung $f(t, v)$ der homogenen Boltzmann-Gleichung 2.29

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (2.30)$$

2. $f(\cdot)$ ist genau dann Gleichgewichtslösung, wenn

$$f(v) = \exp(a + \langle b, v \rangle + c \|v\|^2). \quad (2.31)$$

Beweis: (Siehe [4] (Seite 51))

Hinweis 2.4.8. Nach dem Satz lassen sich alle Gleichgewichtsfunktionen in der Form

•

$$f(v) = M[\rho, \bar{v}, T](v) := \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(v - \bar{v})^2}{2T}\right) \quad (2.32)$$

darstellen. Diese Funktionen heißen auch Maxwell-Funktionen. Die Größen ρ, \bar{v}, T stehen in folgendem Zusammenhang mit Momenten von $M[\rho, \bar{v}, T]$:

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} M[\rho, \bar{v}, T](v) dv \quad (2.33)$$

$$\rho \bar{v} = \int_{\mathbb{R}^d} v \cdot M[\rho, \bar{v}, T](v) dv \quad (2.34)$$

$$\rho T = \frac{1}{d} \int_{\mathbb{R}^d} (v - \bar{v})^2 \cdot M[\rho, \bar{v}, T](v) dv \quad (2.35)$$

und heißen Dichte, Strömungsgeschwindigkeit und Temperatur der Maxwell-Verteilung.

- Die H -Funktion ist eine streng monoton fallende Funktion, solange f keine Maxwell-Funktion ist. Dies lässt die Schlussfolgerung zu, dass f für sehr große t gegen eine Maxwell-Funktion konvergiert.

2.5 Momentengleichung

Hier verwenden wir den Satz (Basis-Kollisionsinvarianten) 2.4.4. Die Boltzmann-Gleichung

$$\partial_t f(t, x, v) + v \nabla_x f(t, x, v) = J[f, f] \quad (2.36)$$

wird mit einer Funktion $\phi(v)$ von den Basis-Kollisionsinvarianten multipliziert. Dann wird das Ergebnis bezüglich v über \mathbb{R}^d integriert. Man erhält die Gleichung

$$\partial_t \int_{\mathbb{R}^d} \phi(v) f(t, x, v) dv + \nabla_x \int_{\mathbb{R}^d} v \cdot \phi(v) \cdot f(t, x, v) dv = 0. \quad (2.37)$$

2.5.1 Definition

Momente: Zu einer nichtnegativen Dichtefunktion $f(., ., .) \neq 0$ auf \mathbb{R}^d definieren wir – falls die folgenden Integrale existieren –

die Massen (Dichte ρ)

$$\rho := \int_{R^d} f(v) \, dv, \quad (2.38)$$

die Strömungsgeschwindigkeit $\bar{v} = (\bar{v}_i)_{i=1}^d$ mit

$$\bar{v}_i := \frac{1}{\rho} \int_{R^d} v_i f(v) \, dv, \quad (2.39)$$

den Spannungstensor $\mathbf{P} = (p_{ij})_{i,j=1}^d$ mit

$$p_{ij} := \int_{R^d} (v_i - \bar{v}_i) \cdot (v_j - \bar{v}_j) f(v) \, dv = \int_{R^d} v_i \cdot v_j f(v) \, dv - \rho \bar{v}_i \bar{v}_j, \quad (2.40)$$

den Druck P

$$P := \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d p_{ii}, \quad (2.41)$$

die Energiedichte \mathbf{E} mit

$$\mathbf{E} := \int_{R^d} \|v\|^2 f(v) \, dv, \quad (2.42)$$

die Dichte der inneren Energie e mit

$$e := \frac{1}{2\rho} \int_{R^d} \|v - \bar{v}\|^2 f(t, x, v) \, dv = \frac{d \cdot P}{2\rho}, \quad (2.43)$$

und die Temperatur \mathbf{T} mit

$$\mathbf{T} := \frac{P}{\rho} \quad (2.44)$$

Bemerkung: Für Maxwell-Funktionen gilt $\mathbf{P} = P \cdot I$.

Definition 2.5.1. (*Momentenflüsse*): Der Fluß $F(v)$ einer Größe $\Phi = \int_{R^d} \phi(v) f(t, x, v) \, dv$ ist definiert durch

$$F(v) := \int_{R^d} v \phi(v) f(t, x, v) \, dv. \quad (2.45)$$

Der Wärmeflußvektor q ist

$$q := \int_{R^d} (v - \bar{v}) \|v - \bar{v}\|^2 f(t, x, v) \, dv \quad (2.46)$$

Der Fluß der Energiedichte

$$F(E) := \frac{1}{2} \int_{R^d} v \cdot \|v\|^2 \cdot f(v) dv = \rho \left(\frac{1}{2} \|\bar{v}\|^2 + e \right) \bar{v} + \mathbf{P} \cdot \bar{v} + \mathbf{q} \quad (2.47)$$

Bemerkung: Nach der Definition von *Momentenflüssen* kann man die Gleichung 2.37 in der Form

$$\partial_t \Phi(t, x) + \nabla_x F[\Phi](t, x) = 0 \quad (2.48)$$

erhalten.

Satz 2.5.2. Sei $f(t, x, v)$ eine nicht-negative Dichtefunktion mit der Eigenschaft

$$\int_{R^d} (1 + \|v\|^2 + \|v\|^3) \cdot f(v) dv < \infty. \quad (2.49)$$

Dann gilt

$$\partial_t \rho + \nabla_x (\rho \bar{v}) = 0$$

$$\partial_t (\rho \bar{v}) + \nabla_x (\rho \cdot \bar{v} \otimes \bar{v} + \mathbf{P}) = 0 \quad (2.50)$$

$$\partial_t \mathbf{E} + \nabla_x \left(\rho \left(\frac{1}{2} \|\bar{v}\|^2 + e \right) \bar{v} + \mathbf{P} \cdot \bar{v} + q \right) = 0$$

mit dem Tensorprodukt $(\bar{v} \otimes \bar{v})_{ij} = \bar{v}_i \cdot \bar{v}_j$.

Beweis: Seien $\phi_i, i = 0, \dots, d+1$ die in Definition 2.4.3 definierten Basis-Kollisionsinvarianten, und $\Phi_i(t, x) = \int_{R^d} \phi_i(t, x, v) \cdot f(t, x, v) dv$, d.h.

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \rho, \\ (\Phi_i)_{i=1}^3 &= \rho \cdot \bar{v}_i, \\ \Phi_4 &= E \end{aligned} \quad (2.51)$$

und $F[\Phi_i(t, x)] = \int_{R^d} v \cdot \phi_i(t, x, v) \cdot f(t, x, v) dv$, d.h.

$$\begin{aligned} F[\Phi_0] &= \rho \cdot \bar{v}, \\ F[(\Phi_i)_{i=1}^3] &= (\rho \cdot \bar{v} \otimes \bar{v} + \mathbf{P}), \\ F[\Phi_4] &= \rho \left(\frac{1}{2} \|\bar{v}\|^2 + e \right) \bar{v} + \mathbf{P} \cdot \bar{v} + q. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Danach ersetzen wir die Gleichungen 2.51 und 2.52 in der Gleichung 2.48 und erhalten die Momentengleichungen 2.50. \square

2.6 Randbedingungen

Hier möchten wir Methoden darstellen, die für die Implementierung verschiedenen Randbedingung der Gleichung 2.36 benutzt werden. Sei die Dichtefunktion $f(t, x, v)$ mit $t \geq 0$, $x \in D \subset \mathbb{R}^m$, $v \in \mathbb{R}^d$ gegeben.

Für jeden Punkt a am Rand ∂D definieren wir die Teilmengen $\mathbb{R}_{in}^d(a)$ und $\mathbb{R}_{out}^d(a)$ wie folgt:

$$\mathbb{R}_{in}^d(a) = \{v : v \in \mathbb{R}^d \quad \& \quad \langle v, n(a) \rangle > 0\} \quad (2.53)$$

und

$$\mathbb{R}_{out}^d(a) = \{v : v \in \mathbb{R}^d \quad \& \quad \langle v, n(a) \rangle < 0\}. \quad (2.54)$$

2.6.1 Deterministische Reflexionsgesetze

Deterministische Reflexionsgesetze werden durch bijektive Abbildung

$$R(a, \cdot) : \mathbb{R}_{out}^d(a) \rightarrow \mathbb{R}_{in}^d(a) \quad (2.55)$$

formuliert: Teilchen, die mit der Geschwindigkeit v bei $a \in \partial D$ auftreffen, werden mit der neuen Geschwindigkeit $w = R(a, v)$ reflektiert.

Die zugehörige *Randbedingung* lautet

$$|\langle v, n(a) \rangle| \cdot f(t, a, v) = |\langle w, n(a) \rangle| \cdot f(t, a, w). \quad (2.56)$$

Beispiele:

- **Die inverse Reflexion:** In diesem Fall wird $R(a, \cdot)$ durch folgende Formel

$$R(a, v) = -v \quad (2.57)$$

definiert. Und durch $|\langle v, n(a) \rangle| = |\langle -v, n(a) \rangle|$ gilt die zugehörige Randbedingung

$$f(t, a, v) = f(t, a, -v), \quad v \in \mathbb{R}_{in}^d(a).$$

- **Die elastische (oder Spiegel-) Reflexion:** wird beschrieben durch die Abbildung

$$R(a, v) = v - 2 \cdot \langle v, n(a) \rangle \quad (2.58)$$

Und durch $|\langle v, n(a) \rangle| = |\langle v - 2 \cdot \langle v, n(a) \rangle, n(a) \rangle|$ gilt die zugehörige Randbe-

dingung

$$f(t, a, v) = f(t, a, v - 2 \cdot \langle v, n(a) \rangle), \quad v \in \mathbb{R}_{in}^d(a).$$

2.6.2 Stochastische Reflexionsgesetze

Stochastische Reflexionsgesetze werden durch Scharen von Wahrscheinlichkeitsmaßen beschrieben.

Trifft ein Teilchen mit der Geschwindigkeit v im Punkt a auf die Wand auf, so wird es zufällig gemäß $R_a(\cdot|v)$ zurück reflektiert. $R_a(\cdot|v)$ gibt damit die Geschwindigkeitsverteilung aller dieser Teilchen nach dem Stoß mit der Wand an. Sind die Maße R_a absolut stetig, d.h. $R_a(dw|v) = r_a(w|v)dw$, so lautet die zugehörige Randbedingung für $\langle w, n(a) \rangle > 0$

$$|\langle v, n(a) \rangle| \cdot f(t, a, v) = \int_{w \in \mathbb{R}_{out}^d(a)} r_a(w|v) \cdot |\langle w, n(a) \rangle| f(t, a, w) dw. \quad (2.59)$$

Bemerkung:

$$\int_{v \in \mathbb{R}_{out}^d(a)} r_a(w|v) \cdot dv = 1, \quad \forall a \in \partial D \text{ und } w \in \mathbb{R}_{in}^d(a) \quad (2.60)$$

und

$$\int_{v \in \mathbb{R}_{out}^d(a)} |\langle v, n(a) \rangle| \cdot f(t, a, v) dv = \int_{w \in \mathbb{R}_{in}^d(a)} |\langle w, n(a) \rangle| \cdot f(t, a, w) dw. \quad (2.61)$$

Beispiele:

- Die diffuse Randbedingung in einem Randpunkt x_a mit der Wandtemperatur T_a und tangentielle Geschwindigkeit v_a :

$$f(t, x_a, v) = M_a(v) \cdot \int_{R_{out}^d} |\langle w, n(x_a) \rangle| \cdot f(t, x_a, w) dw, \quad v \in R_{in}^d,$$

wobei:

$$M_a(v) = m \cdot e^{\frac{-|v-v_a|^2}{2T_a}}, \quad m = \left(\int_{R_{in}^d} e^{\frac{-|v-v_a|^2}{2T_a}} \cdot |\langle v, n(a) \rangle| dv \right)^{-1} = (2\pi T_a)^{\frac{-(d+1)}{2}}.$$

Wir können sehen, dass die Massenflüsse nach außen und nach innen gleich sind, d. h.

$$\int_{R_{in}^d} |\langle v, n(a) \rangle| \cdot f(t, x, v) \, dv = \int_{R_{out}^d} |\langle w, n(a) \rangle| \cdot f(t, x, w) \, dw.$$

In diesem Beispiel ist :

$$r_a(v/w) = |\langle v, n(a) \rangle| \cdot M_a(v).$$

3 Die diskretisierte Boltzmann-Gleichung

3.1 Diskretisierung im Geschwindigkeitsraum

3.1.1 Das Gitter

Ausgangspunkt unserer Untersuchungen ist die Diskretisierung der Geschwindigkeit im Raum \mathbb{R}^d mit einem kinetischen Modell, das für numerische Simulationen verwendet werden kann. Sei $\wp \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2, 3\}$ eine endliche nicht leere Menge. Wir schreiben ihre Elemente $g \in \wp$ als $g = (v_1^g, \dots, v_d^g)^T$, oder kurz, falls eine Verwechslung ausgeschlossen ist, $g = (v_1, \dots, v_d)^T$. Darüber hinaus bezeichnen wir $|g|^2 := v_1^2 + \dots + v_d^2$. Für die Funktionen $f, h \in (R)^{|\wp|}$ definieren wir das Skalarprodukt $\langle f, g \rangle \in \mathbb{R}$ und das Komponentenweise-Produkt $f \odot g \in (R)^{|\wp|}$ als

$$\langle f, g \rangle = \sum_{g \in \wp} f_g \cdot h_g, \quad f \odot h = (f_g \cdot h_g)_{g \in \wp}. \quad (3.1)$$

Funktionen von besonderem Interesse sind die Momente $b_0, b_{1,s} : (s = 1, \dots, d)$ und $b_2 \in (R)^{|\wp|}$ (Vektoren), welche mittels

$$b := (1)_{g \in \wp}, \quad b_{1,s} := (v_s)_{g \in \wp}, \quad b_2 := \frac{1}{2} (|v|^2)_{g \in \wp} \quad (3.2)$$

definiert werden.

Wenn $f \in \mathbb{R}^{|\wp|}$ die Dichteverteilung ist, dann repräsentieren $\langle b_0, f \rangle, \langle b_{1,s}, f \rangle$ und $\langle b_2, f \rangle$ die physikalischen Größen Masse ρ , Impuls $\rho \bar{v}_s$ und kinetische Energie E . Das Gitter \wp muss groß genug sein, um zwischen den relevanten physikalischen Momenten zu ermitteln. Darüber hinaus werden wir bestimmte Eigenschaften der Symmetrie von \wp verwenden. Dafür brauchen wir die folgenden Annahmen über \wp .

Annahmen zum Gitter (G1)

1. Für jedes $g = (v_1, \dots, v_d)^T \in \wp$ und jede Zahl $\sigma_s \in \{-1, 1\} : s \in \{1, \dots, d\}$ gilt $(\sigma_1 v_1, \dots, \sigma_d v_d)^T \in \wp$.
2. $b_0, b_{1,s}$ und b_2 sind linear unabhängig.

Der zweite Teil der Annahme (G1) ist sehr wichtig. Um schnell zu überprüfen, ob unser Gitter sie erfüllt, formulieren wir das folgende Lemma 3.1.1.

Lemma 3.1.1. *Sei $p_1 p_2 p_3 p_4$ ein konvexes Viereck, wobei $p_1, p_2, p_3, p_4 \in \wp$ und $\overrightarrow{p_1 p_4}$, $\overrightarrow{p_2 p_3}$ seine Diagonalen sind, dann gelten:*

1. $p_1 p_2 p_3 p_4$ ist ein Rechteck $\Leftrightarrow \begin{cases} p_1 + p_4 = p_2 + p_3 \\ p_1^2 + p_4^2 = p_2^2 + p_3^2 \end{cases}$.
2. $p_1 p_2 p_3 p_4$ ist ein Sehnenviereck (dessen Eckpunkte auf einem Kreis liegen) \Leftrightarrow

$$\exists \alpha, \beta \in (0, +\infty) : \begin{cases} \alpha \cdot \overrightarrow{p_1 p_2} + \beta \cdot \overrightarrow{p_1 p_3} = \overrightarrow{p_1 p_4}, \\ \alpha \cdot (\overrightarrow{p_1 p_2})^2 + \beta \cdot (\overrightarrow{p_1 p_3})^2 = (\overrightarrow{p_1 p_4})^2 \end{cases}$$

3. **Falls $d=2$:** Wenn $p_1 p_2 p_3 p_4$ kein Sehnenviereck ist, sind die Vektoren $b_0, b_{1,\dots,d}$ und b_2 linear unabhängig.

Falls $d=3$: Die Vektoren $b_0, b_{1,\dots,d}$ und b_2 sind linear unabhängig, wenn $p_1 p_2 p_3 p_4$ kein Sehnenviereck ist und ein Punkt $p_5 \in \wp$ existiert, wobei p_5 außerhalb der Ebene $p_1 p_2 p_3 p_4$ liegt.

Beweis

1. Siehe Lemma 2.2.1.
2. Den Beweis dieses Teils überlassen wir dem Leser (Siehe Abb.3.1.)
3. Es ist leicht zu beweisen, dass

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} \alpha \cdot \overrightarrow{p_1 p_2} + \beta \cdot \overrightarrow{p_1 p_3} = \overrightarrow{p_1 p_4} \\ \alpha \cdot (\overrightarrow{p_1 p_2})^2 + \beta \cdot (\overrightarrow{p_1 p_3})^2 \neq (\overrightarrow{p_1 p_4})^2 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \\ & \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha \cdot \overrightarrow{p_1 p_2} + \beta \cdot \overrightarrow{p_1 p_3} = \overrightarrow{p_1 p_4} \\ \alpha \cdot (p_2^2 - p_1^2) + \beta \cdot (p_3^2 - p_1^2) \neq (p_4^2 - p_1^2) \end{array} \right\} \end{aligned}$$

Die folgenden Mengen werden häufig verwendet: $F = (0, \infty)^{|\varphi|}$, die abgeschlossene Hülle $\bar{F} = [0, \infty)^{|\varphi|}$ und der Rand $\partial F = \bar{F} \setminus F$.

Elemente von \bar{F} werden auch **Dichte-Vektoren** genannt. Die Dichte-Vektoren in ∂F sind alle nicht-negative Vektoren, für die mindestens eine der Komponenten Null ist. Für die vorgegebene Funktion $f \in \mathbb{R}^{|\varphi|}$ definieren wir den **Momentenvektor** $m[f] \in \mathbb{R}^{d+2}$ gemäß

$$m[f] := (m_0[f], m_{1,s}[f], m_2[f])^T := (\langle b_0, f \rangle, \langle b_{1,s}, f \rangle, \langle b_2, f \rangle), \quad (3.3)$$

$$s = 1, \dots, d.$$

Für $\rho > 0$ wird die offene Teilmenge F_ρ von $\mathbb{R}^{|\varphi|}$ definiert

$$F_\rho = \{ f \in F : m_0[f] < \rho \}. \quad (3.4)$$

Wie die entsprechenden Momente definieren wir die beschränkten und offenen Teilmengen von \mathbb{R}^{d+2}

$$M_\rho = m[F_\rho], \quad M = \bigcup_{\rho > 0} M_\rho. \quad (3.5)$$

Eine besondere Rolle spielen die Maxwell-Funktionen $e^{\rho, \bar{v}, T}$ für $\rho, T > 0$ und $\bar{v} = (\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_d)$, die wie folgt definiert werden:

$$e^{\rho, \bar{v}, T} = c \cdot \exp \left(\frac{- \sum_{s=1}^d (v_s^g - \bar{v}_s)}{2T} \right), \quad (3.6)$$

wobei $c > 0$ so gewählt ist, dass

$$m_0[e^{\rho, \bar{v}, T}] = \rho.$$

Beim diskretisierten Geschwindigkeitsraum haben die Größen \bar{v} , T keine physikalische Bedeutung. Deswegen definieren wir jetzt die Abbildung $\phi : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+ \rightarrow M$ mit $\mathbb{R}_+ = (0, +\infty)$ und

$$\phi(\rho, \bar{v}, T) = m[e^{\rho, \bar{v}, T}]. \quad (3.7)$$

Bemerkung 3.1.3. *Im Kontinuumfall, wenn $\varphi = \mathbb{R}^d$ ist, dann gilt $\phi(\rho, \bar{v}, T) = (\rho, \rho \bar{v}, \rho T + \frac{\rho}{2} |\bar{v}|^2)$ und diese Abbildung ist ein Diffeomorphismus. Für endliche Gitter ist diese Relation gestört. Die Störung ist umso geringer, je dichter φ den Raum \mathbb{R}^d umfasst. Im Fall von endlichen Gittern ist es offensichtlich, dass die Momente \bar{v}*

und T nur innerhalb bestimmter Schranken approximieren können.

Für vernünftige Gitter ist es plausibel, wenn die folgende Annahme gemacht wird.

Annahme (G2)

Es gibt eine offene beschränkte nicht leere Teilmenge M^0 mit dem Abschluss $\overline{M^0} \subseteq M$, so dass die Restriktion der Abbildung $\phi|_{\overline{M^0}}$ ein Diffeomorphismus ist.

Wir bezeichnen \mathbf{M} als die Menge der zulässigen Momente und schreiben für alle $\mu \in \mathbf{M}$

$$e[\mu] := e^{\phi^{-1}(\mu)}. \quad (3.8)$$

Bemerkung 3.1.4. Der Tangentialraum der Abbildung $e[\cdot] : \mathbf{M} \rightarrow F$ in μ ist:

$$T_\mu = \text{span} (b_0 \odot e[\mu] , b_{1,s} \odot e[\mu] , b_2 \odot e[\mu]) \quad \text{für } s = 1, \dots, d. \quad (3.9)$$

Für $f \in \overline{F}$ definieren wir die **H-Funktion** durch

$$H[f] = \langle \ln(f), f \rangle = \sum_{g \in \wp} \ln(f_g) \cdot f_g, \quad (3.10)$$

wobei zu berücksichtigen ist, dass $x \cdot \ln(x) = 0$ für $x = 0$.

Die Extremwerte der H-Funktion möchten wir im folgenden Lemma untersuchen. Wir zeigen, dass die H-Funktion keine lokalen Minima in ∂F besitzt.

Lemma 3.1.5. Sei $\mu = (\rho, \bar{v}, T) \in \mathbf{M}$. In $m^{-1}[\mu] \cap F$ hat H sein absolutes Minimum in $e[\mu]$.

Beweis:

Wir definieren U als Abschluss von $m^{-1}[\mu] \cap F$, dann ist U konvex und H ist stetig in U und nimmt daher ihr Minimum in U an. Es sei $f^0 \in m^{-1}[\mu] \cap \partial F$ und $\gamma \in \wp$, so dass $f_\gamma^0 = 0$. Für jede $f^* \in m^{-1}[\mu] \cap F$ definieren wir die Funktion $f : [0, 1] \rightarrow U$,

$$f(\alpha) = \alpha \cdot f^* + (1 - \alpha) \cdot f^0. \quad (3.11)$$

Dann gilt $\partial_\alpha H(f^0) = -\infty$. Die Funktion $H[f(\alpha)]$ ist eine streng fallende Funktion in $\alpha = 0$, deshalb hat H kein Minimum in f^0 . Außerdem gilt:

$$\exists \delta_0 > 0 : \quad \forall \alpha < \delta_0 \Rightarrow \partial_\alpha H[f(\alpha)] < 0$$

d.h.

$$\exists \delta_0 > 0 : \quad \forall \alpha < \delta_0 \Rightarrow H[f(\alpha)] < H[f(0)] . \square$$

Um das lokale Minimum von H mithilfe der Lagrange-Multiplikatoren " $\lambda_0, \lambda_{1,s} (s = 1, \dots, d)$ und λ_2 (vereinigt in einem Vektor λ)" zu bestimmen, brauchen wir die notwendige Voraussetzung, dass die Zielfunktion

$$\Psi[f] = H[f] + \langle \lambda, m[f] - (\rho, \bar{v}, T) \rangle \quad (3.12)$$

differenzierbar sein muss. Dies ist ein Standard-Problem der Optimierung und zeigt, dass f^s , wo H ein lokales Minimum hat, eine Maxwell-Funktion ist (siehe [68] Seite 45). \square

3.1.2 Der Kollisionsoperator

Als **Kollisionsoperator** bezeichnen wir eine Abbildung

$$J : \bar{F} \times \bar{F} \rightarrow \mathbb{R}^{|\wp|},$$

welche die folgende Annahme (J1) erfüllt. Außerdem nennen wir die Vektoren $k \in \mathbb{R}^{|\wp|}$ **Kollisionsinvarianten**, falls diese

$$\langle k, J[f, f] \rangle = 0 \quad , \quad \forall f \in \bar{F}, \quad (3.13)$$

erfüllen.

Annahme (J1):

1. $J \in C^2(\bar{F}, \mathbb{R}^{|\wp|})$.
2. Der Raum der Kollisionsinvarianten ist $B = \text{span}\{b_0, b_{1,s}, b_2\}$ mit $(s = 1, \dots, d)$, und das ist äquivalent zu

$$R(J[f, f]) = B^\perp. \quad (3.14)$$

3. Für jede $f \in \bar{F}$ gilt:

$$J[f, f] \neq 0 \Rightarrow \langle \ln(f), J[f, f] \rangle = \sum_{g \in \ell} \ln(f_g) \cdot J[f, f]_g \leq 0, \quad (3.15)$$

und für $f \in m^{-1}[M]$,

$$\langle \ln(f), J[f, f] \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad f = e[m[f]]. \quad (3.16)$$

4. Sei DJ_f die Jacobi-Matrix von J . Für $\mu \in M$ definieren wir

$$\overline{DJ}_\mu = \text{diag}(e[\mu](\cdot)^{-1/2}) \cdot DJ_{e[\mu]} \cdot \text{diag}(e[\mu](\cdot)^{1/2}), \quad (3.17)$$

dann ist \overline{DJ}_μ symmetrisch und

$$DJ_{e[\mu]} = B^\perp. \quad (3.18)$$

Lemma 3.1.6. *Wir nehmen an, dass (J1) erfüllt ist. Dann gilt:*

(a): $\ker(DJ_{e[\mu]}) = e[\mu] \odot B$.

(b): \overline{DJ}_μ hat nur negative Eigenwerte.

(c): Für $f \in m^{-1}[M] \cap F$ haben wir die folgenden äquivalenten Aussagen:

$$J[f, f] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \langle \ln(f), J[f, f] \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f = e[m[f]]. \quad (3.19)$$

Bevor dieser Nachweis geführt wird, notieren wir das folgende Lemma.

Lemma 3.1.7. *Für alle $\psi \in B^\perp$ gilt*

$$\langle J(e[\mu] + \varepsilon\psi, e[\mu] + \varepsilon\psi), \ln(e[\mu] + \varepsilon\psi) \rangle = \varepsilon^2 \langle DJ_{e[\mu]}, e[\mu]^{-1} \odot \psi \rangle + O(\varepsilon^3). \quad (3.20)$$

Beweis

Aus der Taylorentwicklung von J, \ln :

$$\left. \begin{aligned} J(e[\mu] + \varepsilon\psi, e[\mu] + \varepsilon\psi) &= \varepsilon DJ_{e[\mu]} \cdot \psi + \varepsilon^2 r_\varepsilon + O(\varepsilon^3) \\ \ln(e[\mu] + \varepsilon\psi) &= \ln(e[\mu]) + \varepsilon \frac{\psi}{e[\mu]} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\langle J(e[\mu] + \varepsilon\psi, e[\mu] + \varepsilon\psi), \ln(e[\mu] + \varepsilon\psi) \rangle = \varepsilon^2 \langle DJ_{e[\mu]} \cdot \psi, e[\mu]^{-1} \odot \psi \rangle + O(\varepsilon^3),$$

womit $r_\varepsilon \in B^\perp$. Dabei beachten wir, dass $\ln(e[\mu]) \in B$.

Beweis des Lemmas 3.1.6:

(a): Aus der Annahme (J1(4)) folgt, dass $\ker(DJ_{e[\mu]})$ die Dimension $(d+2)$ hat. Und weil $J|_{e[M]} = 0$ und der Tangentialraum in $e[\mu]$ bei $e[\mu] \odot B$ aufgespannt werden, erhalten wir $e[\mu] \odot B \subseteq \ker(DJ_{e[\mu]})$.

(b): Wir haben $\ker(\overline{DJ}_\mu) = (e[\mu])^{1/2} \odot B$. Wir nehmen an, dass \overline{DJ}_μ einen Eigenwert $\lambda > 0$ mit zugehörigem Eigenvektor ϕ besitzt. Dann ist $\psi = (e[\mu])^{1/2} \phi$ und $DJ_{e[\mu]}\psi = \lambda\psi$. Aus Lemma 3.1.7 folgt

$$\langle J(e[\mu] + \varepsilon\psi, e[\mu] + \varepsilon\psi), \ln(e[\mu] + \varepsilon\psi) \rangle = \varepsilon^2 \lambda \langle \psi, e[\mu]^{-1} \odot \psi \rangle + O(\varepsilon^3) > 0$$

für hinreichend kleines ε , was im Widerspruch zu Annahme (J1(3)) steht. Damit müssen alle Eigenwerte unbedingt negativ sein, woraus sich die Aussage ergibt.

(c): Wir werden die folgende Äquivalenzkette beweisen.

$$J[f, f] = 0 \xLeftrightarrow{\alpha} \langle J[f, f], \ln(f) \rangle = 0 \xLeftrightarrow{\beta} f = e[m[f]] \xLeftrightarrow{\gamma} J[f, f] = 0. \quad (3.21)$$

(α) ist klar. (β) ist auch klar aus der Annahme J1(3). (γ) Sei $f^* \in m^{-1}[M]$ eine Maxwell-Funktion, dann hat H ein lokales Minimum in f^* . Betrachten wir die Boltzmann-Gleichung auf \wp

$$\partial_t f = J[f, f] \quad (3.22)$$

mit dem Anfangswert $f(0) = f^*$. Wir nehmen an, dass $J[f^*] \neq 0$. Dann ist

$$\partial H[f]|_{t=0} = \langle J[f, f], \ln(f) + \mathbf{1} \rangle = \langle J[f, f], \ln(f) \rangle < 0, \quad (3.23)$$

was im Widerspruch zu der Tatsache steht, dass $H[f]$ sein lokales Minimum bei $t = 0$ erreicht. \square

3.1.3 Kritische Punkte

Definition 3.1.8. Die Funktionen f^* , welche keine Maxwell-Funktionen sind, heißen **kritische Punkte**, wenn $J[f^*, f^*] = 0$.

Aus dem Lemma 3.1.6 erkennen wir, dass sich die kritischen Punkte nur in ∂F befinden können. Die Menge von kritischen Punkten wird als F_{kr} bezeichnet. Die genaue Definition ist

$$F_{kr} = \{ f \in \partial F \mid J[f, f] = 0 \}. \quad (3.24)$$

Kritische Punkte werden künstlich aus der Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums entstehen. Allerdings sind diese Punkte keine lokalen Minima der H-Funktion (siehe Lemma 3.1.5), und damit instabil im Rahmen der Boltzmann-Gleichung.

Sei $f^{(0)} \in M$ und $f(t)$ die Lösung des AWP

$$\partial_t f = J[f, f], \quad f(0) = f^{(0)}. \quad (3.25)$$

Die Spur von $f(0)$ ist definiert als

$$tr(f^{(0)}) = \{f(t) \mid t \geq 0\}. \quad (3.26)$$

Wir nennen $f^{(0)}$ einen zulässigen Anfangswert, falls eine offene Teilmenge $U \subset F$ existiert, für die gilt:

$$\begin{aligned} F_{kr} \cap m^{-1}(M) &\subseteq \bar{U}, \\ tr(f^0) \cap U &= \phi. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Die Menge der zulässigen Anfangswerte, die sich in $F \cap m^{-1}(M)$ befinden, wird F_0 genannt.

Lemma 3.1.9. *Angenommen, G1, G2 und J1 sind erfüllt.*

(a): *Für jeden Anfangswert $f^{(0)} \in F$ hat das Anfangswertproblem 3.26 eine eindeutige globale Lösung in F . Und für alle $t > 0$ ist*

$$m[f(t)] = m[f^{(0)}]. \quad (3.28)$$

(b): *$f^{(0)} \in F_0$. Dann gilt $\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = e[m[f^{(0)}]]$, und es existieren Konstanten $\alpha, \beta > 0$, so dass*

$$\|f(t) - e[m[f^{(0)}]]\| \leq \alpha \cdot \exp(-\beta t). \quad (3.29)$$

Beweis

(a): Aufgrund der Annahmen J1(2) und J1(3), bleibt $f(t)$ in der beschränkten Menge $m^{-1}(m[f^{(0)}])$, solange die Lösung existiert. Und aufgrund von J1(1), ist J global Lipschitz-stetig über alle beschränkten offenen Teilmengen von \bar{F} . Dies liefert globale Existenz und Eindeutigkeit.

(b): Sei $\mu := m[f^{(0)}]$. Sei U die offene Menge, die 3.27 erfüllt. Und sei V eine beliebige Umgebung von $e[f^{(0)}]$. Dann gibt es ein $C > 0$, so dass

$$-\langle J[f, f], \ln[f] \rangle \geq C \quad : \quad f \in m^{-1}(e[\mu]) \setminus (U \cup V). \quad (3.30)$$

Auf der anderen Seite folgt aus

$$\partial_t H[f(t)] = \langle J[f(t), f(t)], \ln(f(t)) \rangle \quad (3.31)$$

dass

$$H[f(0)] - H[f(t)] = - \int_0^t \langle J[f(s), f(s)], \ln(f(s)) \rangle ds. \quad (3.32)$$

Falls die linke Seite in der Formel: $(H_0 - H_t)$ beschränkt ist, muss es einige $t^* < \infty$ mit $f(t) \in V$ geben. Mit $f(t) = e[\mu] + e[\mu]^{1/2} \cdot \phi(t)$ erhalten wir dann das Problem

$$\partial_t \phi = e[\mu]^{-1/2} \cdot J \left[e[\mu] + e[\mu]^{1/2} \cdot \phi, e[\mu] + e[\mu]^{1/2} \cdot \phi \right] \quad (3.33)$$

auf $e[\mu]^{-1/2} \odot B^\perp$. Und weil J zweimal differenzierbar ist, folgt

$$J \left[e[\mu] + e[\mu]^{1/2} \cdot \phi \right] = \overline{D J_\mu} \phi + R_\mu[\phi]. \quad (3.34)$$

Der Rest erfüllt:

$$\|R_\mu[\phi]\| \leq c \cdot \|\phi\|. \quad (3.35)$$

$\overline{D J_\mu}$ ist nicht negativ auf $e[\mu]^{-1/2} \odot B^\perp$. Damit existiert eine $\alpha > 0$, so dass

$$\partial_t \|\phi\|^2 = \left\langle \overline{D J_\mu} \phi, \phi \right\rangle + \langle R_\mu[\phi], \phi \rangle \leq -\alpha \|\phi\|^2 \quad (3.36)$$

für $\|\phi\|$, das klein genug ist. Damit ist gezeigt, dass ϕ exponentiell zerfällt. \square

Für feste $f^0 \in F^0$ und $\delta > 0$ definieren wir $t^\delta < \infty$ durch

$$t^\delta := \inf \left\{ T > 0 : \quad \|f(t) - e[m[f^0]]\| \leq \delta \quad \forall t \geq T \right\}. \quad (3.37)$$

3.2 Linearisierung

Wir haben im obigen Teil des Kapitels bei der Annahme (J1) über die Jacobi-Matrix DJ_f des Stoßoperators $J[f, f]$ gesprochen. Hier möchten wir DJ_f und ihre Eigenschaften (insbesondere die Eigenwerte) untersuchen. (Babovsky hat in seiner Arbeit [10] dieses Problem untersucht.)

Gegeben ist ein endliches Gitter $\wp \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2, 3\}$ mit den Gitterpunkten $v_\alpha = (v_{\alpha,r}, r = 1, \dots, d)$ und $\alpha \in I$ mit einer angemessenen Indexmenge I .

Gegeben ist auch die Rechteckmenge $\Gamma \subset \wp^4$: wenn $\gamma(i, j, k, l) \in \Gamma$, dann $v_i + v_j = v_k + v_l$ ('Impulserhaltungssatz') und $|v_i|^2 + |v_j|^2 = |v_k|^2 + |v_l|^2$ ('Energieerhaltungssatz'). Bevor wir zum Hauptsatz kommen, definieren wir einige Begriffe.

- a) Für alle Rechtecke $\gamma(i, j, k, l) \in \Gamma$ wird der Vektor $r_\gamma \in \{-1, 0, 1\}^{|\wp|}$ wie folgt definiert:

$$r_\gamma = -\delta_i - \delta_j + \delta_k + \delta_l, \quad (3.38)$$

wobei $\delta_i, \delta_j, \delta_k$ und δ_l kanonische Einheitsvektoren von $\mathbb{R}^{|\wp|}$ sind.

- b): Die Matrix R ist eine $|\wp| \times |\Gamma|$ -Matrix, wobei die Spalten von R die Vektoren r_γ sind.

- c):

$$\aleph := \{b \in \mathbb{R}^{|\wp|}, \quad b^T \cdot r_\lambda = 0 : \quad \forall \lambda \in \Gamma\}. \quad (3.39)$$

Daraus folgt

$$\aleph := \{b \in \mathbb{R}^{|\wp|}, \quad R^T \cdot b = 0\}. \quad (3.40)$$

Definition 3.2.1. Für ein Rechteck $\gamma \in \Gamma$ ist die bilineare Abbildung $\hat{J}_\gamma : \mathbb{R}^{|\wp|} \times \mathbb{R}^{|\wp|} \rightarrow \mathbb{R}^{|\wp|}$ folgendermaßen definiert:

$$\hat{J}_\gamma[f, g] = r_\gamma \cdot q_\gamma[f, g], \quad (3.41)$$

wobei

$$q_\gamma[f, g] = \frac{1}{2} [(f_i g_j + f_j g_i) - (f_k g_l + f_l g_k)].$$

Definition 3.2.2. Für Γ und \wp definieren wir die beiden Operatoren $\hat{J} : \mathbb{R}^{|\wp|} \times \mathbb{R}^{|\wp|} \rightarrow \mathbb{R}^{|\wp|}$, wobei:

$$\hat{J}[f, g] = \sum_{\gamma \in \Gamma} c_\gamma^2 \hat{J}_\gamma[f, g] \quad (3.42)$$

für $c_\gamma \in \mathbb{R}^+$ und $J : \mathbb{R}^{|\wp|} \rightarrow \mathbb{R}^{|\wp|}$

$$J[f] = \hat{J}[f, f]. \quad (3.43)$$

Schreibweise: Wir werden auch hier manchmal $J[f, f]$ statt $J[f]$ schreiben, d.h. $J[f, f] \equiv J[f]$.

Lemma 3.2.3. *I) Für alle $e, \phi \in \mathbb{R}^{|\wp|}$ gilt:*

$$DJ_e \cdot \phi = 2\hat{J}[e, \phi].$$

II)

$$DJ_e = - \sum_{\gamma \in \Gamma} c_\gamma^2 (r_\gamma \cdot r_\gamma^T) \cdot M_{\tilde{e}_\gamma}, \quad (3.44)$$

wobei die Matrix $M_{\tilde{e}_\gamma}$ eine diagonale Matrix ist und ihre diagonalen Elemente die Elemente von \tilde{e}_γ sind, wobei

$$\tilde{e}_\gamma \in \mathbb{R}^{|\wp|} \quad \text{mit : } \tilde{e}_{\gamma,i} = e_j, \quad \tilde{e}_{\gamma,j} = e_i, \quad \tilde{e}_{\gamma,k} = e_l, \quad \tilde{e}_{\gamma,l} = e_k.$$

Die Elemente von M können beliebig gewählt sein.

Beweis I): J ist eine bilineare Abbildung, da \hat{J}_γ eine bilineare Abbildung ist. D.h.

$$J[e + \varepsilon\phi, e + \varepsilon\phi] = J[e, e] + 2\varepsilon \cdot \hat{J}[e, \phi] + \varepsilon^2 \cdot J[\phi, \phi].$$

Andererseits ist die Taylorentwicklung von $J[e + \varepsilon\phi, e + \varepsilon\phi]$ an der Stelle e :

$$J[e + \varepsilon\phi, e + \varepsilon\phi] = J[e, e] + \varepsilon \cdot DJ_e \cdot \phi + O(\varepsilon^2).$$

Das ergibt $DJ_e \cdot \phi = 2\hat{J}[e, \phi]$.

II): Für alle Rechtecke $\gamma(i, j, k, l) \in \Gamma$ gilt

$$q_\gamma[e, g] = \frac{1}{2} [(e_i g_j + e_j g_i) - (e_k g_l + e_l g_k)],$$

$$\begin{aligned} q_\gamma[e, g] &= -\frac{1}{2} r_\gamma^T \cdot (\tilde{e}_\gamma \odot g) \\ &= -\frac{1}{2} r_\gamma^T \cdot M_{\tilde{e}_\gamma} \cdot g, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{J}_\gamma[e, g] &= -\frac{1}{2} (r_\gamma \cdot r_\gamma^T) \cdot M_{\tilde{f}_\gamma} \cdot g \\ \Rightarrow DJ_e &= -\sum_{\gamma \in \Gamma} c_\gamma^2 (r_\gamma \cdot r_\gamma^T) \cdot M_{\tilde{e}_\gamma}. \quad \square \end{aligned}$$

Definition 3.2.4. Ein Vektor $e \in (0, \infty)^{|\varphi|}$ heißt Gleichgewichtslage (Maxwell-Funktion) genau dann, wenn: $\forall \gamma(i, j, k, l) \in \Gamma : \hat{J}_\gamma[e, e] = 0$. Außerdem ist der Faktor $\pi_\gamma := e_i e_j = e_k e_l$ definiert.

Eine besondere Rolle spielt die Jacobi-Matrix DJ_e , wenn e eine Gleichgewichtslage ist.

Satz 3.2.5. Sei e eine Maxwell-Funktion, dann gilt:

1.

$$DJ_e = -\left(\sum_{\gamma \in \Gamma} \pi_\gamma c_\gamma^2 r_\gamma \cdot r_\gamma^T\right) \cdot M_{e^{-1}}. \quad (3.45)$$

2.

$$DJ_e = -RC R^T M_{e^{-1}}, \quad (3.46)$$

wobei C eine $|\Gamma| \times |\Gamma|$ -Diagonalmatrix mit nicht negativen Elementen ist.

3. Die Matrix $L := -RC R^T = -\sum_{\gamma \in \Gamma} \pi_\gamma c_\gamma^2 r_\gamma \cdot r_\gamma^T$ ist symmetrisch und negativ semi-definit, und es gilt

$$\phi^T L \phi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \phi \in \aleph.$$

Beweis

1. Wenn wir $\tilde{e}_\gamma = \pi_\gamma e^{-1}$ wählen, dann ist $D_{\tilde{e}_\gamma} = \pi_\gamma D_{e^{-1}}$ und es wird in die Beziehung 3.44 eingesetzt. \square

2. Die Matrix R_γ ist $|\varphi| \times |\Gamma|$ -Matrix, wobei alle Elemente Null sind, außer die Elemente der Spalte γ . Die Spalte γ ist r_γ . Dann gilt:

$$r_\gamma \cdot r_\gamma^T = R_\gamma \cdot R_\gamma^T.$$

Andererseits ist die Matrix I_γ definiert, deren Elemente 0 sind, bis auf $I_\gamma(\gamma, \gamma)$, wobei $I_\gamma(\gamma, \gamma) = 1$. Das ergibt:

$$R_\gamma = R \cdot I_\gamma.$$

Daraus folgt, dass:

$$r_\gamma \cdot r_\gamma^T = R \cdot I_\gamma \cdot (R \cdot I_\gamma)^T = R \cdot I_\gamma \cdot R^T.$$

Das führt zu:

$$DJ_e = -R \left(\sum_{\gamma \in \Gamma} \pi_\gamma c_\gamma^2 I_\gamma \right) \cdot R^T \cdot M_{e-1} = -R \cdot C \cdot R^T \cdot M_{e-1}. \square$$

3. Symmetrische Matrizen besitzen ausschließlich reelle Eigenwerte. L ist eine symmetrische Matrix, da $r_\gamma \cdot r_\gamma^T$ symmetrisch ist. Sei $\phi \neq 0$ ein Eigenvektor von L mit dem Eigenwert λ . Daraus folgt, dass

$$\phi^T L \phi = \lambda \|\phi\|^2.$$

Andererseits ist:

$$\begin{aligned} \phi^T L \phi &= - \sum_{\gamma \in \Gamma} c_\gamma^2 \phi^T r_\gamma r_\gamma^T \phi \\ &= - \sum_{\gamma \in \Gamma} c_\gamma^2 \langle r_\gamma, \phi \rangle^2 \leq 0. \end{aligned}$$

Damit folgt auch, dass λ nicht positiv sein kann. Außerdem folgt nach 3.39 und 3.40, dass:

$$\phi^T L \phi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \phi \in \aleph. \quad \square$$

4 Ein Geschwindigkeitsmodell und der Stoßoperator

Wir wissen schon, dass die Boltzmann-Gleichung aus zwei Teilen (Transport- und Stoßterm) besteht. In diesem Kapitel werden wir uns nur auf den Stoßoperator und die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung konzentrieren. Wir möchten hier einige Modelle der diskretisierten homogenen Boltzmann-Gleichung präsentieren und ihre Gleichgewichtslösungen untersuchen. Im ersten Teil behandeln wir den zweidimensionalen und im zweiten Teil den dreidimensionalen Geschwindigkeitsraum.

Wir werden hier das Quadrat- und das Rechteckmodell untersuchen. Beim ersten Modell (Quadratisches Stoßmodell) sind die Stoßpartner auf einem Quadrat, und beim zweiten auf einem Rechteck angeordnet.

In diesem Kapitel werden wir die kleinste Stoßmenge finden, so dass die Gleichgewichtslösung eine Maxwell-Funktion ist. Andere Gleichgewichtslösungen wären unphysikalisch, würden nicht den Gleichgewichtslösungen im kontinuierlichen Fall entsprechen und würden somit begründete Zweifel am verwendeten Modell erzeugen. Ggf. kann man hierdurch Rechenzeit in numerischen Experimenten sparen, in dem man beispielsweise im Rahmen einer Modellreduktion alle andere Stöße (die nicht in der kleinsten Stoßmenge vorkommen) vernachlässigt. Außerdem wollen wir Algorithmen entwickeln, um alle Quadrate und Rechtecke zu bestimmen.

In der Geometrie ist ein **Rechteck** ein ebenes Viereck, dessen Innenwinkel alle rechte Winkel sind. Eine wichtige Eigenschaft der Rechtecke kann man in dem Lemma [3.1.1](#) sehen:

$$p_1 p_2 p_3 p_4 \text{ ist ein Rechteck} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} p_1 + p_4 = p_2 + p_3 \\ p_1^2 + p_4^2 = p_2^2 + p_3^2 \end{array} \right\}. \quad (4.1)$$

4.1 Diskretisierung des \mathbb{R}^2 und Untersuchung des Stoßoperators

Für eine positive ganze Zahl $n > 2$ definieren wir das **Geschwindigkeitsgitter** G_n folgendermaßen:

$$G_n = \{0, \dots, n-1\} \times \{0, \dots, n-1\}. \quad (4.2)$$

Die Knoten werden in diesem Abschnitt zeilenweise durchnummeriert. Es gilt :

- Der Punkt $(0, 0)$ hat die Nummer 1 und der Punkt $(n-1, n-1)$ hat die Nummer n^2 .
- Sei $p_1 = (x_1, y_1)$, $p_2 = (x_2, y_2) \in G_n$. p_2 hat die größere Nummer als p_1 nur wenn $y_2 > y_1$, oder wenn $y_2 = y_1$ mit $x_2 > x_1$.

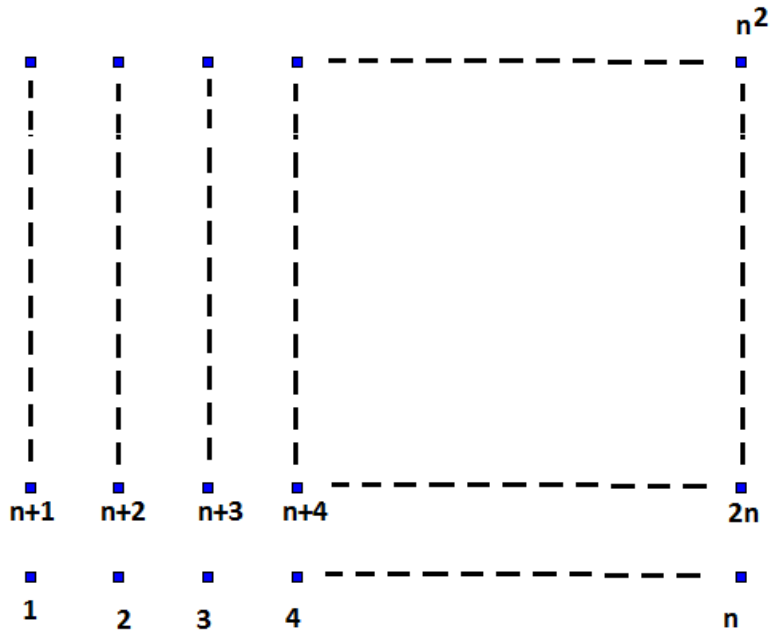


Abbildung 4.1: Geschwindigkeitsgitter G_n

\mathfrak{R} sei die Menge aller Rechtecke, die auf G_n liegen; \mathfrak{Q} sei die Menge aller Quadrate.

Schreibweise: Sei r ein Rechteck aus \mathfrak{R} . Dann schreiben wir $r = [p_{z_1}, p_{z_2}, p_{z_3}, p_{z_4}]$ wobei $z_1, z_2, z_3, z_4 \in \{1, \dots, n^2\}$ und folgende Ordnung gelte:

$$z_1 < z_2 < z_3 < z_4.$$

Kurz schreibt man $r = [z_1, z_2, z_3, z_4]$, wobei z_i der Index von p_{z_i} ist.

Außerdem definieren wir die zwei Operatoren:

1. Addition eines Vektor $\vec{s} \in \mathbb{Z}^2$ zu einem Rechteck $r = [p_{z_1}, p_{z_2}, p_{z_3}, p_{z_4}]$, $p_i \in G_n$.
Das Ergebnis ist ein verschobenes Rechteck $r + \vec{s} = [p_{z_1} + \vec{s}, p_{z_2} + \vec{s}, p_{z_3} + \vec{s}, p_{z_4} + \vec{s}]$.
2. Addition einer ganzen Zahl $k \in \{0, 1, \dots, n^2 - 1\}$ zu einem Rechteck

$$r = [p_1, p_2, p_3, p_4]$$

definiert durch: $r + k = r + \overrightarrow{p_1 p_{k+1}}$.

Annahme: In diesem Abschnitt schreiben wir $p \in r$ d.h. $p \in \{p_{z_1}, p_{z_2}, p_{z_3}, p_{z_4}\}$, wobei $r = [p_{z_1}, p_{z_2}, p_{z_3}, p_{z_4}]$. Für eine positive ganze Zahl k ist $k \in r$, falls $k \in \{z_1, z_2, z_3, z_4\}$.

4.1.1 Vektoren und Rechtecke

Definition: \mathfrak{Q}^0 ist die Menge aller Quadrate, deren Seitenlänge 1 ist. Demnach kann \mathfrak{Q}^0 folgendermaßen geschrieben werden:

$$\mathfrak{Q}^0 = \left\{ q_0^0 + k + n \cdot l \quad : \quad k, l \in \{0, 1, \dots, (n-2)\} \right\}, \quad (4.3)$$

wobei

$$q_0^0 = \left[1, 2, (n+1), (n+2) \right]. \quad (4.4)$$

Wir definieren außerdem \mathfrak{Q}^1 als die Menge der Quadrate, die am linken und unteren Rand des Gitters liegen und deren Seiten die Größe $\sqrt{2}$ haben. Diese lassen sich darstellen als:

$$\mathfrak{Q}^1 = \left\{ q_0^1 + k + n \cdot l \quad : \quad k, l \in \{0, 1, \dots, (n-3)\} \quad \text{und} \quad k \cdot l = 0 \right\}, \quad (4.5)$$

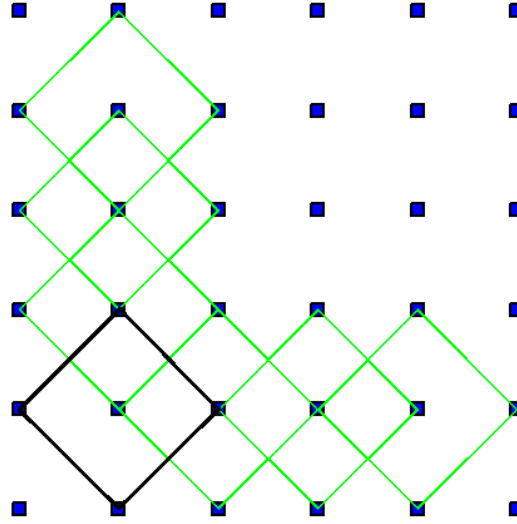
wobei gilt:

$$q_0^1 = \left[2, (n+1), (n+3), (2n+2) \right], \quad (4.6)$$

was in Abbildung 4.2 zu sehen ist.

Definition 4.1.1. Für ein Rechteck wird die Funktion

$$\begin{aligned} g : \mathfrak{R} &\rightarrow \{-1, 0, 1\}^{n^2} \\ g(r) &= e_{z_1} - e_{z_2} - e_{z_3} + e_{z_4} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Abbildung 4.2: Die Menge Ω^1

definiert. Dabei sind $r = [z_1, z_2, z_3, z_4]$, und $e_{z_1}, e_{z_2}, e_{z_3}, e_{z_4}$ kanonische Einheitsvektoren des \mathbb{R}^{n^2} .

Bemerkung: g ist eine injektive Funktion d.h. $g(r_1) = g(r_2) \Rightarrow r_1 = r_2$.

Lemma 4.1.2. Sei $\{b_1, \dots, b_k\}$ eine linear unabhängige Menge und $b_0 = b' + b$, wobei $b' \neq 0$, $\langle b', b \rangle = 0$ und $\langle b', b_i \rangle = 0$, $\forall i \in \{1, \dots, k\}$. Dann ist $B = \{b_0, b_1, \dots, b_k\}$ eine linear unabhängige Menge.

Beweis: $B - \{b_0\}$ ist eine linear unabhängige Menge, das heißt, dass die Gleichung

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i \cdot b_i = 0, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}, \quad j = 1, \dots, k,$$

nur die Null-Lösung haben kann, d. h. $\alpha_j = 0$, $j = 1, \dots, k$.

Man untersucht die Lösung der Gleichung

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i \cdot b_i = 0, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}, \quad j = 0, \dots, k.$$

Die skalare Multiplikation mit b' liefert:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^k \alpha_i \cdot \langle b', b_i \rangle = 0 &\Rightarrow \alpha_0 \cdot \underbrace{\langle b', b_0 \rangle}_{|b'|^2} + \sum_{i=1}^k \alpha_i \cdot \underbrace{\langle b', b_i \rangle}_{=0} = 0, \\ &\Rightarrow \alpha_0 = 0, \end{aligned}$$

d.h. $\sum_{i=0}^k \alpha_i \cdot b_i = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^k \alpha_i \cdot b_i = 0$ und $\alpha_0 = 0$. Daraus folgt, dass die Null-Lösung $\alpha_i = 0, \quad i = 0, \dots, k$ die einzige Lösung ist. \square

Kurzschreibweisen: Wir definieren die Vektormengen V_n^0, V_n^1 und V_n^{01} wie folgt:

•

$$V_n^0 = g(\mathfrak{Q}^0), \quad V_n^1 = g(\mathfrak{Q}^1), \quad V_n^{01} = g(\mathfrak{Q}^0 \cup \mathfrak{Q}^1) = V_n^0 \cup V_n^1. \quad (4.8)$$

• Falls die Gittergröße gegeben ist, schreiben wir kurz V^0, V^1 und V^{01} anstatt V_n^0, V_n^1 und V_n^{01} .

• Für eine beliebige Vektormenge V definieren wir den Operator *rank* folgendermaßen

$$\text{rank}(V) = \dim(\text{span}(V)). \quad (4.9)$$

• Wir definieren den Eins-Vektor $\mathbb{1}$, den X-Komponenten-Vektor v_x , den Y-Komponenten-Vektor v_y und den Energie-Vektor $|v|^2 = v_x^2 + v_y^2$.

• Außerdem ist für $N > 2$ die Menge $\mathfrak{N} = \text{span}\{\mathbb{1}, v_x, v_y, |v|^2\}$.

Lemma 4.1.3. (1) Die Menge V^{01} ist eine linear unabhängige Vektormenge.

(2) $\text{rank}(g(\mathfrak{Q})) = |V^{01}| = n^2 - 4$.

Beweis:

(1) Zuerst beweisen wir den Satz für $n = 3$. Mit Hilfe der vollständigen Induktion kann man den Satz für $n > 3$ beweisen.

Zunächst beginnen wir mit $n = 3$. Siehe Abbildung 4.3

$$\begin{aligned} \mathfrak{Q}^0 &= \left\{ \begin{array}{l} q_1 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 5 \end{bmatrix}, \quad q_2 = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 5 & 6 \end{bmatrix}, \\ q_3 = \begin{bmatrix} 4 & 5 & 7 & 8 \end{bmatrix}, \quad q_4 = \begin{bmatrix} 5 & 6 & 8 & 9 \end{bmatrix} \end{array} \right\}, \\ \mathfrak{Q}^1 &= \left\{ q_5 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} \right\} \end{aligned}$$

• $A_1 = \{g(q_5)\}$ ist eine linear unabhängige Vektormenge, weil $g(q_5) \neq \vec{0}$.

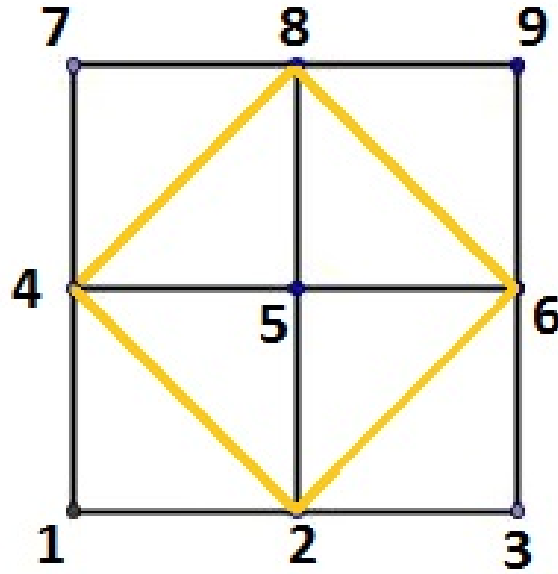


Abbildung 4.3: Das 9-Geschwindigkeiten-Modell

- $A_2 = \{g(q_5), g(q_2)\}$ ist eine linear unabhängige Vektormenge, weil A_1 eine linear unabhängige Vektormenge ist und der Vektor $g(q_2)$ der einzige Vektor aus A_2 ist, dessen 3-te Stelle nicht Null ist. Siehe Lemma 4.1.2.
- $A_3 = \{g(q_5), g(q_2), g(q_3)\}$ ist eine linear unabhängige Vektormenge, weil A_2 eine linear unabhängige Vektormenge ist und der Vektor $g(q_3)$ der einzige Vektor aus A_3 ist, dessen 7-te Stelle nicht Null ist. Siehe Lemma 4.1.2.
- $A_4 = \{g(q_5), g(q_2), g(q_3), g(q_4)\}$ ist eine linear unabhängige Vektormenge, weil A_3 eine linear unabhängige Vektormenge ist und der Vektor $g(q_4)$ der einzige Vektor aus A_4 ist, dessen 9-te Stelle nicht Null ist. Siehe Lemma 4.1.2.
- $A_5 = \{g(q_1), g(q_2), g(q_3), g(q_4), g(q_5)\}$ ist eine linear unabhängige Vektormenge, weil A_4 eine linear unabhängige Vektormenge ist und der Vektor $g(q_1)$ der einzige Vektor aus A_5 ist, dessen 1-te Stelle nicht Null ist. Siehe Lemma 4.1.2.

D.h. V^{01} ist eine linear unabhängige Vektormenge für $n = 3$. Wir setzen voraus, dass V_n^{01} linear unabhängig für $n \geq 3$ ist. Nun möchten wir beweisen, dass die Menge V_{n+1}^{01} linear unabhängig ist. Wenden wir das Lemma 4.1.2 an, so entsteht folgender Algorithmus (siehe Abbildung 4.4). Bei jedem Schritt kommt ein neues Quadrat hinzu, das einen neuen Knoten hat. Dieses ist nicht in der Menge der vorherigen Quadrate enthalten.

Dies bedeutet, dass

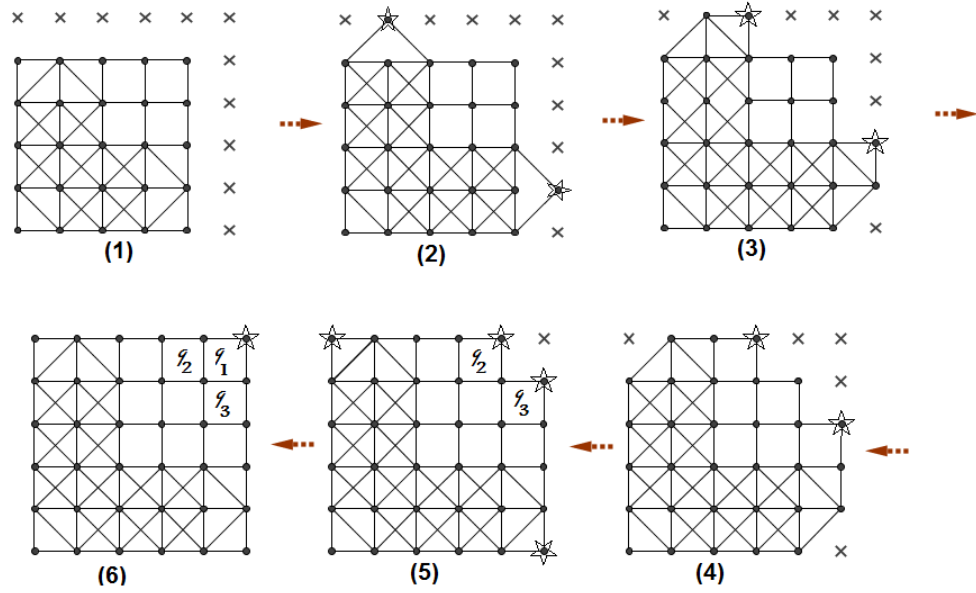


Abbildung 4.4: Darstellung der vollständigen Induktion des Lemmas 4.1.3

$$|g(\Omega)| \geq n^2 - 4. \quad (4.10)$$

(2) Für ein beliebiges Rechteck $r = [p_1 p_2 p_3 p_4]$ wissen wir schon, dass die Komponenten von $g(r)$ Null sind bis auf die zu p_1, p_4 gehörigen Komponenten. Diese sind $+1$. Die zu die p_2, p_3 gehörigen Komponenten sind -1 , (siehe die Definition von $g(\cdot)$ in 4.1.1). Nach 3.1.1 gilt:

$$p_1 p_2 p_3 p_4 \text{ ist ein Rechteck} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} p_1 + p_4 = p_2 + p_3 \\ p_1^2 + p_4^2 = p_2^2 + p_3^2 \end{array} \right\}.$$

Dies ergibt: $\langle g(r), \mathbf{1} \rangle = 0$, $\langle g(r), v_x \rangle = 0$, $\langle g(r), v_y \rangle = 0$, $\langle g(r), |v|^2 \rangle = 0$, und somit

$$g(\Omega) \perp \left\{ 1, v_x, v_y, \frac{1}{2} \|v\|^2 \right\}. \quad (4.11)$$

Es folgt, dass

$$|g(\Omega)| \leq n^2 - 4. \quad (4.12)$$

Aus 4.10 und 4.12 ergibt sich:

$$|g(\Omega)| = n^2 - 4. \quad (4.13)$$

Außerdem gilt aus Lemma 3.1.1, dass für $n \geq 3$ die Vektoren $\mathbb{1}, v_x, v_y, |v|^2$ linear unabhängig sind. \square

Bemerkungen und Ergebnisse 4.1.4. (a)

$$\aleph = \text{span} \{1, v_x, v_y, \|v\|^2\}, \quad \text{span} \{g(\aleph)\} = \aleph^\perp \quad (4.14)$$

Wenn $\varphi \in \aleph$, so kann man alle Komponenten von φ ermitteln, wenn vier bestimmte Stellen von φ bekannt sind.

(b) Für

$$\forall q = [z_1, z_2, z_3, z_4] \in \aleph \text{ und } \forall \varphi \in \aleph$$

gilt, dass:

$$\langle \varphi, g(q) \rangle = 0. \quad (4.15)$$

Das ist äquivalent zu $\varphi_{z_1} + \varphi_{z_4} = \varphi_{z_2} + \varphi_{z_3}$.

(c) Für das 9-Geschwindigkeiten-Modell in Bild 4.3 folgt: Falls $\varphi_2, \varphi_4, \varphi_5, \varphi_8$ gegeben sind, so folgt daraus mit Hilfe von 4.15 sofort, dass:

φ_7	φ_8	φ_9	\Rightarrow	$\varphi_7 = (\varphi_8 + \varphi_4 - \varphi_5)$	φ_8	$\varphi_9 = (2\varphi_8 + \varphi_2 - \varphi_4 - \varphi_5)$
φ_4	φ_5	φ_6		φ_4	φ_5	$\varphi_6 = (\varphi_8 + \varphi_2 - \varphi_4)$
φ_1	φ_3	φ_3		$\varphi_9 = (\varphi_4 + \varphi_2 - \varphi_5)$	φ_2	$\varphi_3 = (\varphi_8 + 2\varphi_2 - \varphi_4 - \varphi_5)$

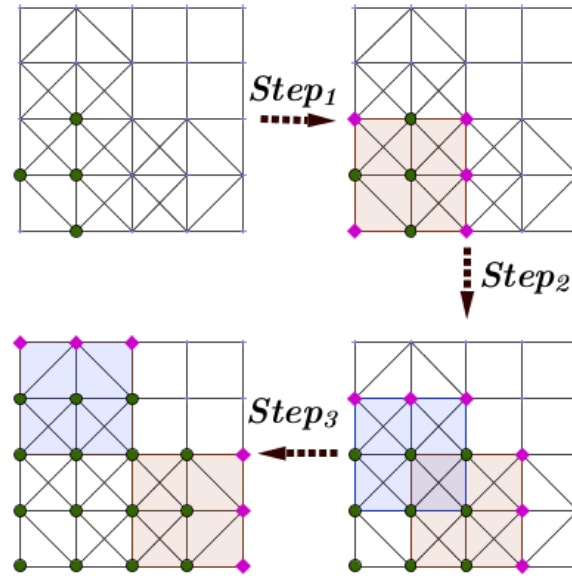
(4.16)

Darüber hinaus können wir, wenn man nur die Quadrate von V^{01} betrachtet, für $n > 3$ die Werte von φ in den drei unteren Zeilen und den drei linken Spalten mit Hilfe des Algorithmus berechnen, der in Abbildung 4.5 beschrieben wird.

(d) Wenn wir nur die kleinen Quadrate V^0 für das n^2 -Modell betrachten, reicht es, die Werte von φ in der unteren Zeile und der linken Spalte zu kennen, um alle Werte von φ zu bestimmen, was leicht zu beweisen ist.

Zusammenfassung: Wir haben für ein beliebiges n^2 -Modell die Komponenten eines Vektors $\varphi \in \aleph$ nur anhand der Menge V^{01} und mit Hilfe von vier bestimmten bekannten Stellen von φ berechnet. Im Folgenden sei $NQ_0 = |V^{01}|$ und $NQ = |\aleph|$.

Wir haben bewiesen, dass V^{01} eine Basis von $g(\aleph)$ ist. Eine wichtige Frage ist, wie man die Elemente von $g(\aleph)$ als Linearkombination von Elementen von V^{01} schreiben

Abbildung 4.5: Algorithmus zur Berechnung eines Vektors aus $g(\Omega)^\perp$.

kann. Im Folgenden definieren wir die Matrix B_0 : Ihre Spalten sind die Elemente von V^{01} . Weil V^{01} eine Basis von $g(\Omega)$ ist, folgt:

$$\forall q \in \Omega \exists w \in \mathbb{R}^{NQ_0}, \text{ so dass } B_0 \cdot w = g(q). \quad (4.17)$$

Allerdings sind die Spalten von B_0 linear unabhängig und $\text{rang}(B_0) = NQ_0$. Dies ergibt $\text{rang}(B_0^T \cdot B_0) = NQ_0$, d.h. die inverse Matrix $(B_0^T \cdot B_0)^{-1}$ existiert und das bedeutet, dass die Gleichung 4.17 nur eine Lösung haben kann. Diese lautet:

$$w = (B_0^T B_0)^{-1} \cdot B_0^T \cdot g(q).$$

B sei eine Matrix, deren Spalten die Elemente von $g(\Omega)$ sind; dann existiert die zugehörige $NQ_0 \times NQ$ – Koordinatenmatrix W .

$$B_0 \cdot W = B \quad \Rightarrow \quad W = (B_0^T B_0)^{-1} \cdot B_0^T \cdot B. \quad (4.18)$$

Im Folgenden möchten wir untersuchen, wie die Elemente der Matrix W aussehen.

Definition 4.1.5. Jedes Quadrat aus Ω heißt **PrimQuadrat**, wenn seine Seiten mit G_n nur seine Knoten als gemeinsame Punkte haben.

Hinweis 4.1.6. • Hier betrachten wir die Schreibweise: Für jedes Quadrat $q =$

$[p_1, p_2, p_3, p_4]$ ist :

$$\begin{aligned} y_1 &= \min \{y_1, y_2, y_3, y_4\}, & y_4 &= \max \{y_1, y_2, y_3, y_4\} \\ x_2 &= \min \{x_1, x_2, x_3, x_4\}, & x_3 &= \max \{x_1, x_2, x_3, x_4\}, \end{aligned}$$

das heißt, dass p_1 der untere Punkt von q ist, p_4 der obere Punkt ist, p_2 der rechte ist, und p_3 der linke.

- Sei $\vec{r} := \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} := \overrightarrow{p_1 p_2}$ und $\vec{r}^\perp := \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}$, dann sind a, b nicht negative ganze Zahlen und man kann die Knoten durch $p_1, \vec{r}, \vec{r}^\perp$ schreiben in der Form

$$\begin{aligned} p_1 &= p_1, & p_2 &= p_1 + \vec{r}, \\ p_3 &= p_1 + \vec{r}^\perp, & p_4 &= p_1 + \vec{r} + \vec{r}^\perp. \end{aligned}$$

- Die Quadrate, die dasselbe \vec{r} haben, sind identisch bis auf eine Verschiebung.
- Sei $[p_1, \vec{r}]$ die Schreibweise für das Quadrat q mit Hilfe von p_1 und \vec{r} .

Im folgenden Lemma möchten wir die PrimQuadrate untersuchen.

Lemma 4.1.7. *Unter den Annahmen und den Definitionen in 4.1.6 ist ein Quadrat $q = [p_1, p_2, p_3, p_4]$ ein PrimQuadrat nur wenn $ggT(a, b) = 1$, wobei die Funktion $ggT(., .)$ den größten gemeinsamen Teiler darstellt und $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} := \overrightarrow{p_1 p_2}$.*

Beweis

Sei (p_1, p_2) die Menge aller Punkte, die auf der Strecke zwischen p_1, p_2 liegen

$$(p_1, p_2) = \{p_1 + \alpha \cdot \vec{r}, \quad \alpha \in [0, 1]\}.$$

Die Frage lautet jetzt, wann ist $\alpha \cdot \vec{r} \in \mathbb{N}^2$? Wir werden diese Frage im Folgenden beantworten:

$$\begin{aligned} m &:= ggT(a, b) \Rightarrow \\ \exists k_1, k_2 \in \mathbb{N} \text{ mit } ggT(k_1, k_2) &= 1; \quad \left\{ \begin{array}{l} a = m \cdot k_1 \\ b = m \cdot k_2 \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\alpha \cdot \vec{r} \in \mathbb{N}^2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \alpha m \cdot k_1 \\ \alpha m \cdot k_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^2,$$

dann

$$\exists u, v \in \mathbb{N}, ggT(u, v) = 1; \quad \alpha m = \frac{u}{v},$$

$$\begin{pmatrix} u \cdot \left(\frac{k_1}{v}\right) \\ u \cdot \left(\frac{k_2}{v}\right) \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^2 \Rightarrow v \text{ ist ein gemeinsamer Teiler von } k_1, k_2$$

und wegen $ggT(k_1, k_2) = 1$ ist $v = 1$ und es folgt:

$$\begin{aligned} \exists k \in \mathbb{N}; \quad \alpha \cdot m = k, \quad \text{aber} \quad \alpha \in [0, 1] \Rightarrow \\ \alpha \in \left\{ \frac{k}{m}, \quad k = 0, 1, \dots, m \right\}. \end{aligned}$$

Das bedeutet:

$$(p_1, p_2) \cap G_n = \left\{ p_1 + \frac{k}{m} \vec{r}, \quad k = 0, 1, \dots, m \right\}.$$

Ebenso folgt:

$$(p_3, p_4) \cap G_n = \left\{ p_3 + \frac{k}{m} \vec{r}, \quad k = 0, 1, \dots, m \right\},$$

$$(p_1, p_3) \cap G_n = \left\{ p_1 + \frac{k}{m} \vec{r}^\perp, \quad k = 0, 1, \dots, m \right\},$$

$$(p_2, p_4) \cap G_n = \left\{ p_2 + \frac{k}{m} \vec{r}^\perp, \quad k = 0, 1, \dots, m \right\}.$$

Außerdem ist:

$$(p_3, p_4) \cap G_n = \{p_1, p_2\} \Leftrightarrow m = 1. \quad \square$$

Hinweis 4.1.8. • Ein beliebiges Quadrat $q = [p_1, p_2, p_3, p_4]$ mit $\overrightarrow{p_1 p_2} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ ist in m^2 PrimQuadrate zerlegbar, wobei $m = ggT(a, b)$ und die Quadrate mit dem Quadrat $\left[p_1, \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix} \right]$ identisch bis auf eine Verschiebung sind.

- Für jedes Rechteck $p_1 p_2 p_3 p_4$ existieren ein Vektor \vec{r} und $m, n \in \mathbb{N}$, so dass $[p_1, \vec{r}]$ ein PrimQuadrat ist, und

$$\begin{aligned} p_2 &= p_1 + m \cdot \vec{r}, \\ p_3 &= p_1 + n \cdot \vec{r}^\perp, \\ p_4 &= p_1 + m \cdot \vec{r} + n \cdot \vec{r}^\perp. \end{aligned}$$

Das heißt, das Rechteck wird in $n \cdot m$ PrimQuadrate zerlegt, die mit dem Quadrat $[p_1, \vec{r}]$ identisch sind. (Der Beweis ist ähnlich wie im Lemma 4.1.7).

Im folgenden Lemma untersuchen wir die Komponenten der Matrix W .

Lemma 4.1.9. 1. Wird ein Rechteck r durch Geraden, die parallel zu den Rechteckseiten sind, in m Rechtecke $\{r_i, i = 1, \dots, m\}$ zerlegt, und liegen die Schnittpunkte der Geraden auf dem Gitter G_n , dann gilt

$$g(r) = \sum_{i=1}^m g(r_i). \quad (4.19)$$

2. Ist q ein Quadrat aus \mathfrak{Q} mit der Seitenlänge $\sqrt{2}$, dann gilt:

$$\exists a_1, \dots, a_{NQ_0} \in \mathbb{Z} \quad \text{mit} \quad g(q) = \sum_{i=1}^{NQ_0} a_i \cdot b_i. \quad (4.20)$$

3. Ist q ein Quadrat aus \mathfrak{Q} , dann gilt:

$$\exists a_1, \dots, a_{NQ_0} \in \frac{1}{2}\mathbb{Z} \quad \text{mit} \quad g(q) = \sum_{i=1}^{NQ_0} a_i \cdot b_i. \quad (4.21)$$

4. Ist r ein Rechteck aus dem Gitter G_n , dann gilt:

$$\exists a_1, \dots, a_{NQ_0} \in \frac{1}{2}\mathbb{Z} \quad \text{mit} \quad g(r) = \sum_{i=1}^{NQ_0} a_i \cdot b_i. \quad (4.22)$$

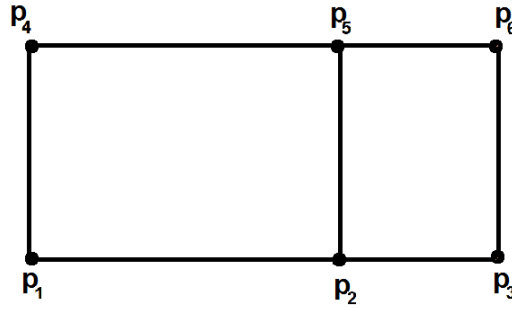
Beweis:

1. Das Rechteck r besteht aus zwei Rechtecken r_1, r_2 , mit $r_1 = [p_1, p_2, p_5, p_4]$, $r_2 = [p_2, p_3, p_6, p_5]$ und es sei $r = p_1 p_3 p_6 p_4$, wobei $p_1, \dots, p_6 \in G_n$, siehe Abb. 4.6. Nun schreiben wir $g(\cdot)$ wie im obigen Teil, und betrachten nur die sechs Stellen p_1, \dots, p_6 .

$$\begin{aligned} g(r_1) &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T, \\ g(r_2) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}^T, \\ g(r) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T. \end{aligned}$$

Es ist jetzt klar, dass $g(r) = g(r_1) + g(r_2)$. Es folgt, dass man für jedes Rechteck r , dessen Seiten parallel mit dem Achsen sind, $g(r)$ als Linearkombination aus $g(\mathfrak{Q}^0)$ mit ganzzahligen Koeffizienten (Null oder Eins) darstellen kann.

2. Ähnlich wie im ersten Beweisteil bestimmen wir die Abbildung g für die kleinen Quadrate $\{q'_0 + k + l \cdot n, k, l = 0, 1, 2\}$, siehe Abb. 4.7, sowie für

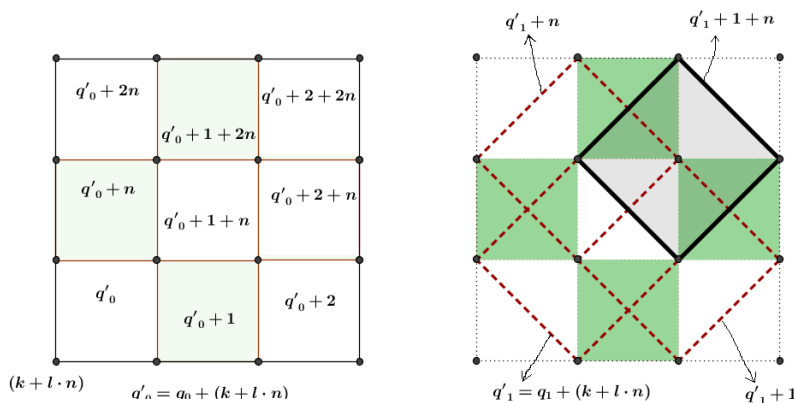
Abbildung 4.6: Rechtecke und Quadrate in G_n .

$\{q'_1 + k + l \cdot n, k, l = 0, 1\}$. Danach versuchen wir $g(q'_1 + 1 + n)$ als Linearkombination von V^{01} darzustellen.

$$g(q'_1 + 1 + n) = \left\{ \begin{array}{l} -g(q'_0 + 1) + g(q'_0 + n) + \\ -g(q'_0 + 2 + n) + g(q'_0 + 1 + 2n) \end{array} \right\} + \quad (4.23)$$

$$+ \left\{ \begin{array}{l} g(q'_1) - g(q'_1 + 1) + \\ g(q'_1 + n) \end{array} \right\}.$$

Falls eins oder mehrere der Quadrate $q'_1, q'_1 + 1, q'_1 + n$ nicht aus \mathfrak{Q}^1 sind, werden wir dasselbe Verfahren benutzen. Für jedes Mal gehen die neuen Quadrate nach unten und links. Schließlich bekommen wir $g(q'_1 + 1 + n)$ als Linearkombination aus V^{01} , außerdem sind die Koeffizienten aus \mathbb{Z} . Es folgt, dass man für alle Rechtecke r , deren Seiten parallel mit der Winkelhalbierenden sind, $g(r)$ als Linearkombination in V^{01} mit ganzzahligen Koeffizienten darstellen kann.

Abbildung 4.7: Quadrate in G_n

3. In Abb. 4.8 ist $q = ABCD$ ein Quadrat, womit $A, B, C, D \in G_n$ und Aa, Cc, Bd

und bD parallel mit der X-Achse sind, und Bb, Dd, Ac und aC sind parallel mit der Y-Achse. Dann sind die Dreiecke

$$\overbrace{Ae_1B}^{\Delta}, \overbrace{Be_2C}^{\Delta}, \overbrace{Ce_3D}^{\Delta} \text{ und } \overbrace{De_4A}^{\Delta}$$

kongruent. Daraus folgt:

$$\begin{aligned} e_2c &= e_3C = e_1b = e_2B = e_4a = e_1A = e_3d = e_4D, \\ e_2C &= e_3c = e_1B = e_2b = e_4A = e_1a = e_3D = e_4d. \end{aligned}$$

Dies ergibt, dass $bC, Bc, aD, AD, aB, Ab, dC$ und Dc die Diagonale von Quadraten sind, deren Seiten parallel zu den Achsen sind. D.h. dass bC, Bc, aD und AD parallel mit der Winkelhalbierenden des ersten Quadranten sind, sowie aB, Ab, dC und Dc parallel mit der Winkelhalbierenden des zweiten Quadranten sind. Außerdem sind die Punkte a, b, c, d Gitterpunkte. Mit kleinen Rechnungen erhalten wir

$$g(q) = \frac{1}{2} \{ [g(aBcD) + g(AbCd)] - [g(AaCc) + g(BbDd)] \}. \quad (4.24)$$

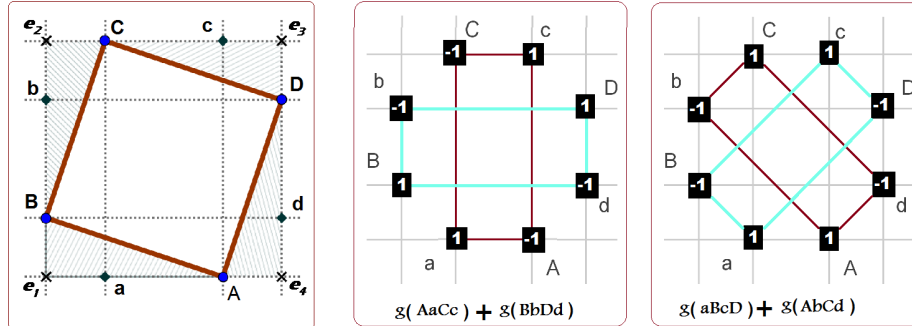


Abbildung 4.8: Berechnen der g -Funktion.

4. Nach Hinweis 4.1.8 und vorherigen Teil dieses Lemmas kann man die Aussage leicht beweisen.

4.1.2 Algorithmen für Quadrate auf dem Gitter G_n

Hier möchten wir zeigen, wie man alle Quadrate in G_n finden kann. Dadurch beantworten wir einige Fragen. z.B.

- Wie ist die Anzahl aller Quadrate in G_n ?
- Wie ist Anzahl der Quadrate in G_n , die einen gemeinsamen Knoten p haben?

Lemma 4.1.10. 1. Die Knoten jedes Quadrates $q = [g_1, g_2, g_3, g_4] \in \mathfrak{Q}$, wobei $g_i = (x_i, y_i)$, liegen auf den Seiten eines einzigen Quadrates $\hat{q} = [\hat{g}_1, \hat{g}_2, \hat{g}_3, \hat{g}_4] \in \mathfrak{Q}$, $g_i = (\hat{x}_i, \hat{y}_i)$, dessen Seiten parallel zu den Achsen sind.

2. Für ein Quadrat $\hat{q} = [\hat{g}_1, \hat{g}_2, \hat{g}_3, \hat{g}_4] \in \mathfrak{Q}$ (Seitenlänge k), dessen Seiten parallel zu den Achsen sind, existieren k Quadrate aus \mathfrak{Q} , deren Knoten an den Seiten von \hat{q} liegen.

Beweis:

1. Falls die Seiten von q parallel zu den Achsen sind, dann sind q und \hat{q} identisch. Andernfalls sei:

$$A = \max \{x_1, x_2, x_3, x_4\}, \quad a = \min \{x_1, x_2, x_3, x_4\},$$

$$B = \max \{y_1, y_2, y_3, y_4\}, \quad b = \min \{y_1, y_2, y_3, y_4\},$$

und die vier Punkte $\hat{g}_1, \hat{g}_2, \hat{g}_3, \hat{g}_4$ seien folgende:

$$\hat{g}_1 = (a, b), \quad \hat{g}_2 = (A, b), \quad \hat{g}_3 = (A, B), \quad \hat{g}_4 = (a, B). \quad (4.25)$$

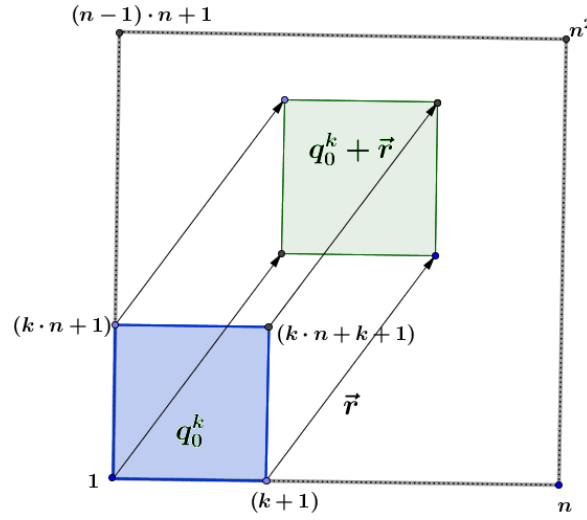
Dann ist

$$\hat{q} = [\hat{g}_1, \hat{g}_2, \hat{g}_3, \hat{g}_4], \quad (4.26)$$

wie in Abbildung 4.9 zu sehen ist.

2. Aus Abb. 4.9 sieht man leicht, dass für jedes $s \in \{0, \dots, (k-1)\}$ ein Quadrat q existiert. \square

Lemma 4.1.11. 1. Es existieren $(n-k)^2$ Quadrate auf G_n , deren Seiten parallel zu den Achsen verlaufen und welche die Seitenlänge $k \in \{1, \dots, (n-1)\}$ besitzen. Die Menge dieser Quadrate heißt $Q^{(k)}$.

Abbildung 4.10: Verschiebung von q_0^k

ist:

$$\check{Q}^{(k)}(q) = \left\{ g_1 + [g_1^s, g_2^s, g_3^s, g_4^s] : \quad s \in \{0, \dots, (k-1)\}, \quad \left. \begin{array}{l} g_1^s = (s, 0) , \\ g_2^s = (k, s) , \\ g_3^s = (k-s, k) , \\ g_4^s = (0, k-s) \end{array} \right\} \right\}. \quad (4.28)$$

Daraus folgt, dass:

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^{n-1} \left(\bigcup_{q \in Q^{(k)}} \check{Q}^{(k)}(q) \right). \quad (4.29)$$

Die Anzahl aller Quadrate in G_n ist:

$$|\Omega| = \sum_{k=1}^{n-1} |Q^{(k)}| \cdot |\check{Q}^{(k)}| \quad (4.30)$$

$$= \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 \cdot k = \frac{n^2(n^2-1)}{12}.$$

□

Quadrate-Algorithmus

Durch die Bewegung des Punktes (x_o, y_o) im Gitter $G_n = \{0, 1, \dots, n-1\}^2$ und bei Betrachtung aller möglichen Werte von k , können wir alle Quadrate, die sich in G_n befinden, berechnen. Es folgt nun ein Algorithmus, um alle Quadrate in G_n zu bestimmen:

```

Squares = [ ]
for k = 1 to (n - 1) do
  for x_o = 0 to (n - k - 1) do
    for y_o = 0 to (n - k - 1) do
      for s = 0 to (k - 1) do
        g1 = ( s , 0 )
        g2 = ( k , s )
        g3 = ( k - s , k )
        g4 = ( 0 , y1 + k - s )
        q = [g1, g2, g3, g4] + (x_o, y_o)
        The_List_of_Squares = [ q ; Squares ]
      end
    end
  end
end
end
end

```

Im Folgenden möchten wir die Anzahl der Quadrate untersuchen, die einen gemeinsamen Punkt haben.

Wir betrachten zuerst die Menge \mathbb{Z}^2 als diskretisierten Geschwindigkeitsraum und $p_1 = (x_1, y_1), p_2 = (x_2, y_2) \in \mathbb{Z}^2$. Jetzt lautet die Frage, welche Bedingungen müssen p_1, p_2 erfüllen, damit $\overline{p_1 p_2}$ eine Diagonale in einem Quadrat bildet, dessen Knoten aus \mathbb{Z}^2 stammen. Sei $p_1 p_3 p_2 p_4$ ein Quadrat mit der Diagonale $p_1 p_2$. Dann ergeben sich p_3, p_4 durch die folgende Gleichung:

$$p_{3,4} = \frac{p_1 + p_2}{2} \mp \left(\frac{p_1 - p_2}{2} \right)^\perp, \quad (4.31)$$

wobei $(a, b)^\perp = (b, -a)$. Daraus folgt:

$$\begin{aligned} p_3 &= \frac{1}{2} (x_1 + x_2, y_1 + y_2) + \frac{1}{2} (y_1 - y_2, x_2 - x_1) \\ &= \frac{1}{2} (x_1 + x_2 + y_1 - y_2, y_1 + y_2 + x_2 - x_1) \end{aligned} \quad (4.32)$$

und

$$\begin{aligned} p_4 &= \frac{1}{2} (x_1 + x_2, y_1 + y_2) - \frac{1}{2} (y_1 - y_2, x_2 - x_1) \\ &= \frac{1}{2} (x_1 + x_2 + y_2 - y_1, y_1 + y_2 + x_1 - x_2). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Die Knoten p_3, p_4 können nur aus \mathbb{Z}^2 sein, wenn vier Zahlen $k_1, k_2, k_3, k_4 \in \mathbb{Z}$ existieren, so dass gilt:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + y_1 - y_2 &= 2k_1, \\ y_1 + y_2 + x_2 - x_1 &= 2k_2, \\ x_1 + x_2 + y_2 - y_1 &= 2k_3, \\ y_1 + y_2 + x_1 - x_2 &= 2k_4. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Aber wir wissen schon, dass :

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{Z} \Rightarrow [(\alpha + \beta) \text{ ist eine gerade Zahl}] \Leftrightarrow [(\alpha - \beta) \text{ ist eine gerade Zahl}].$$

Dadurch ergibt sich, dass

$$\exists \tilde{k} \in \mathbb{Z} : (x_1 + y_1) + (x_2 + y_2) = 2\tilde{k}. \quad (4.35)$$

Lemma 4.1.12. 1. Die Relation Λ auf \mathbb{Z}^2 , die folgendermaßen definiert ist, ist eine Äquivalenzrelation.

$$\forall p_1, p_2 \in \mathbb{Z}^2 : p_1 \Lambda p_2 \Leftrightarrow (x_1 + y_1) + (x_2 + y_2) \in 2\mathbb{Z}. \quad (4.36)$$

2. $\overline{p_1 p_2}$ kann nur dann eine Diagonale in einem Quadrat mit Knoten aus \mathbb{Z}^2 sein, wenn $p_1 \Lambda p_2$.

Beweis: Den Beweis überlassen wir dem Leser.

Bemerkung:

(I) Die Relation Λ auf \mathbb{Z}^2 , die im letzten Lemma definiert ist, zerlegt \mathbb{Z}^2 in zwei Äquivalenzklassen, und diese sind:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= [(0, 0)]_\Lambda = \{(x, y) \in \mathbb{Z}^2 : (x + y) \in 2\mathbb{Z}\}, \\ \tilde{A}_2 &= [(1, 0)]_\Lambda = \{(x, y) \in \mathbb{Z}^2 : (x + y) \in 2\mathbb{Z} + 1\}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

(II) Im Folgenden sei $n = 2K + 1$, wobei $K \in \mathbb{N}$ ist. In diesem Fall können wir das

Gitter umformulieren, also

$$G_{2K+1} = \underbrace{\{-K, \dots, 0, \dots, K\}}_{G_{2K+1}^0}^2 + p_o. \quad (4.38)$$

Dabei ist $p_o \in \mathbb{Z}^2$ der zentrale Punkt; außerdem hat p_o die Nummer $\frac{n^2+1}{2}$ in der obigen Gitternummerierung. Gegeben sei $p = (a, b) \in G_{2K+1}^0$. Wir fragen nun, welche Bedingungen auf einen Punkt $h = (x, y) \in G_{2K+1}^0 \cap [(a, b)]_\Lambda$ zutreffen müssen, damit die Knoten des Quadrates, dessen Diagonale ph ist, wieder in G_{2K+1}^0 liegen.

Für die Antwort setzen wir voraus, dass $a \geq b \geq 0$. Dann muss

$$\frac{p+h}{2} \pm \left(\frac{p-h}{2} \right)^\perp \in G_{2K+1}^0 \quad (4.39)$$

gelten. Dies führt zu folgenden acht Ungleichungen:

$$\begin{aligned} -2K &\leq (a+x) + (b-y) \leq 2K, \\ -2K &\leq (a+x) - (b-y) \leq 2K, \\ -2K &\leq (b+y) + (a-x) \leq 2K, \\ -2K &\leq (b+y) - (a-x) \leq 2K. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Daraus folgt, dass h in dem Achteck $p_1 p_2 p_3 p_4 p_5 p_6 p_7 p_8$ (siehe Abb. 4.11) liegen muss, wobei:

$$\begin{aligned} p_1 &= (K, K+b-a), \quad p_2 = (K+b-a, K), \\ p_3 &= (a+b-K, K), \quad p_4 = (-K, K-a-b), \\ p_i &= -p_{i-4}, \quad i = 5, 6, 7, 8. \end{aligned} \quad (4.41)$$

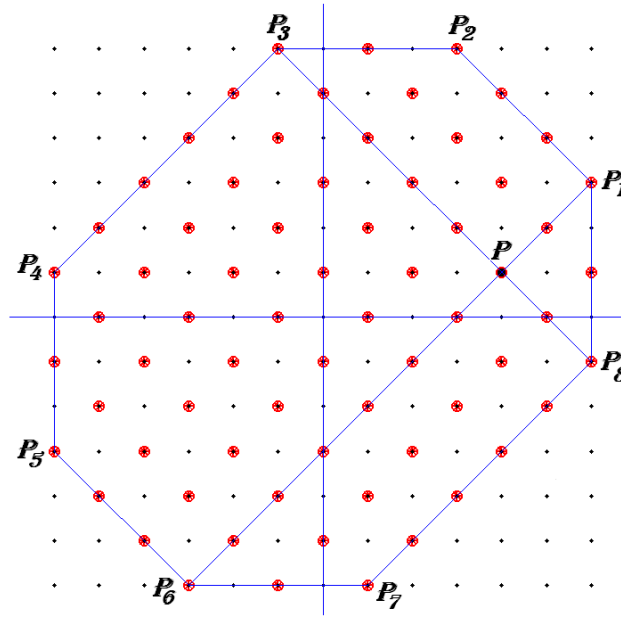


Abbildung 4.11: Beschreibung

Lemma 4.1.13. *Die Funktion*

$$S_K(a, b) = S_K(0, 0) - (a^2 + b^2) = 2K(K + 1) - (a^2 + b^2). \quad (4.42)$$

beschreibt die Anzahl aller Quadrate auf G_{2K+1}^0 , die $p(a, b)$ als einen Knoten besitzen.

Beweis: Wir führen den Beweis unter der Annahme $a \geq b \geq 0$ (wie oben) durch, und aus Abb. 4.11 folgt:

$$|[p]_{\Lambda} \cap G_{2K+1}^0| = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} [p_1 p_2] + 1 \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} [p_1 p_6] + 1 \right) + 2 \sum_{r=1}^{K-a} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} [p_1 p_6] + 1 - 2r \right). \quad (4.43)$$

Die Strecken $[p_1 p_2]$ und $[p_1 p_6]$ werden wie folgt berechnet:

$$[p_1 p_2] = \sqrt{2}(a - b), \quad [p_1 p_6] = \sqrt{2}(2K + b - a). \quad (4.44)$$

Dann folgt:

$$\begin{aligned} |[p]_{\Lambda} \cap G_{2K+1}^0| &= (a - b + 1)(2K + b - a + 1) + 2 \sum_{r=1}^{K-a} (2K + b - a + 1 - 2r) \\ &= 2K(K + 1) - (a^2 + b^2) + 1. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Das ergibt:

$$S_K(a, b) = |[p]_\Lambda \cap G_{2K+1}^0 - \{p\}| = 2K(K+1) - (a^2 + b^2). \quad (4.46)$$

Aufgrund der Symmetrieeigenschaften folgt, dass

$$\begin{aligned} \forall \alpha, \beta \in \{-K, \dots, K\} \Rightarrow \\ S_K(\alpha, \beta) &= S_K(\beta, \alpha) = S_K(-\alpha, \beta) \Rightarrow \\ S_K(\alpha, \beta) &= S_K(\max\{|\alpha|, |\beta|\}, \min\{|\alpha|, |\beta|\}) \\ &= 2K(K+1) - (\alpha^2 + \beta^2). \quad \square \end{aligned} \quad (4.47)$$

Bemerkung: Die Anzahl aller Quadrate in G_{2K+1}^0 ist:

$$|\mathfrak{Q}| = \frac{1}{4} \sum_{a=-K}^K \sum_{b=-K}^K S_K(a, b) = \frac{K(K+1)(2K+1)^2}{3} = \frac{n^2(n^2-1)}{12}, \quad (4.48)$$

und das entspricht Lemma 4.1.11.

4.1.3 Algorithmen für Rechtecke auf G_n

In diesem Teil möchten wir eine Methode entwickeln, um alle Rechtecke in G_n zu finden. Bevor wir zum zugehörigen Algorithmus kommen, betrachten wir folgendes Lemma.

Hinweis 4.1.14. *Jedes Rechteck r auf G_n ist eine Verschiebung eines anderen Rechtecks r_0 auf G_n . Hierbei liegt ein Knoten von r_0 auf der unteren Zeile von G_n und ein zweiter Knoten liegt auf der linken Spalte von G_n . D.h.*

$$\exists k_1, k_2 \in \{0, \dots, (n-1)\}, \quad r = r_0 + \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix}.$$

Der Algorithmus

Hier nehmen wir an, dass die unteren Knoten von G_n auf der x-Achse und die linken Knoten von G_n auf der y-Achse liegen.

Der Algorithmus zum Finden aller Rechtecke auf G_n besteht aus den folgenden Schritten:

- **Der erste Schritt:** Man findet alle möglichen Strecken, die den unteren Rand

von G_n mit dem linken verbinden. Diese Strecken sind

$$\left\{ (p_1, p_2), \quad \begin{array}{l} p_1 = (a, 0) \\ p_2 = (0, b) \end{array}, \text{ wobei } a \in \mathbb{N}^*, b \in \mathbb{N} \right\}.$$

- **Der zweite Schritt:** Für eine Strecke $p_1 = (a, 0), p_2 = (0, b)$ suchen wir nach dem Vektor \vec{s} .

$$\vec{s} = \left(\frac{b}{m}, \frac{a}{m} \right), \quad m = \text{ggT}(a, b).$$

- **Der dritte Schritt:** Wir finden die Rechteckmenge $R_{ab}^{(0)}$ durch:

$$R_{ab}^{(0)} = \left\{ \begin{array}{l} k \in \mathbb{N}, \\ [p_1, (p_1 + k\vec{s}), (p_2 + k\vec{s}), p_2], \text{ wobei:} \\ (p_1 + k\vec{s}), (p_2 + k\vec{s}) \in G_n. \end{array} \right\}$$

- **Der vierte Schritt:** R_{ab} ist die Menge aller möglichen Verschiebungen von $R_{ab}^{(0)}$, die noch auf dem Gitter liegen.

$$R_{ab} = \left\{ \bigcup_{\vec{h} \in \mathbb{N}^2} [R_{ab}^{(0)} + \vec{h}] \right\} \cap G_n^4,$$

oder

$$R_{ab} = \left\{ \begin{array}{l} k \in \mathbb{N}, \vec{h} \in \mathbb{N}^2, \\ [p_1, (p_1 + k\vec{s}), (p_2 + k\vec{s}), p_2] + \vec{h}, \text{ wobei:} \\ \begin{array}{l} (p_1 + k\vec{s} + \vec{h}) \in G_n, \\ (p_2 + k\vec{s} + \vec{h}) \in G_n \end{array} \end{array} \right\}.$$

- **Der fünfte Schritt:** Die Menge aller Rechtecke R ist die Vereinigung aller obigen R_{ab} . D.h.

$$R = \bigcup_{(a,b) \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}} R_{ab}.$$

- **Ende.**

Nach dem obigen Algorithmus scheint es nicht einfach zu sein, die Anzahl aller Rechtecke auf G_n zu ermitteln. Um den Verlauf von $|R|$ zu untersuchen, definieren wir den "Differenzen Operator" D wie folgt:

$$D^0 y(n) = y(n), \quad D^{k+1} y(n) = D^k y(n+1) - D^k y(n). \quad (4.49)$$

Der Operator D^k und die k -te Ableitung haben ein ähnliches Verhalten. In der Abb. 4.12 betrachten wir die Kurven von $|\mathfrak{Q}|$, die Anzahl der Quadrate in G_n und ihre D^3, D^4 . Die Kurven zeigen, dass $|\mathfrak{Q}|$ ein Polynom mit dem Grad 4 ist. Das stimmt, da wir schon bestimmt haben, dass $|\mathfrak{Q}| = \frac{n^2(n^2-1)}{12}$.

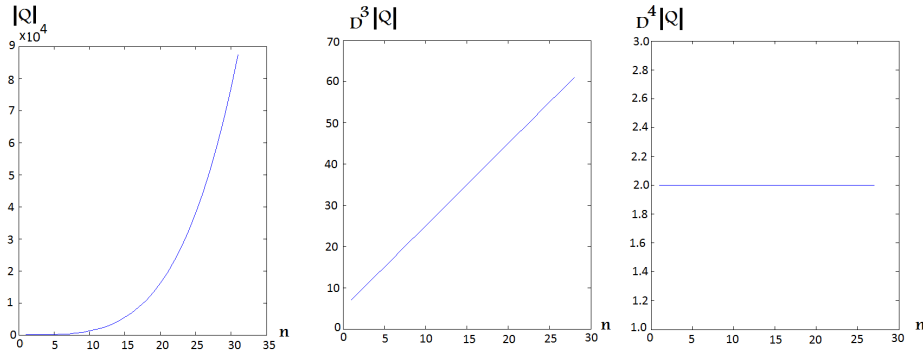


Abbildung 4.12: Differenz Operator von $|\mathfrak{Q}|$

Die Abbildung 4.13 zeigt, dass das Wachstum von $|R|$ unregelmäßig ist und von der Menge der Primzahlen abhängt.

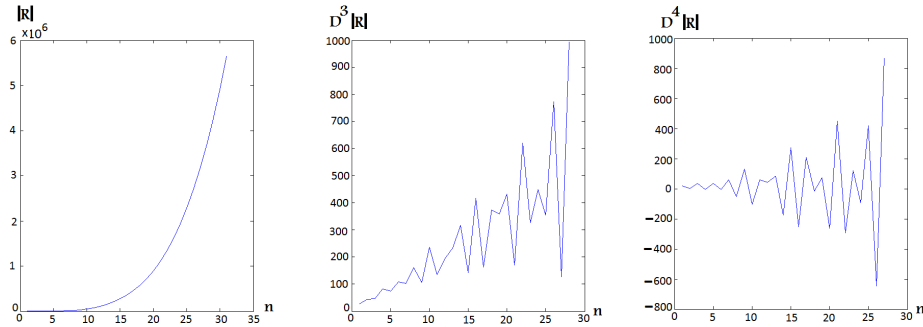


Abbildung 4.13: Differenz Operator von $|R|$

4.2 Der Kollisionsoperator in G_n

Bevor wir den Kollisionsoperator definieren, soll die vollständige Stoßmenge charakterisiert werden. Im Folgenden ist eine Stoßmenge eine Menge von Rechtecken in G_n .

Definition 4.2.1. Eine Menge von Rechtecke R in G_n heißt **vollständig**, wenn

$$\text{rank}(g(R)) = (n^2 - 4) \quad (4.50)$$

gilt.

Beispielsweise ist $\mathfrak{Q}^0 \cup \mathfrak{Q}^1$ eine vollständige Stoßmenge, und es folgt, dass die Menge aller Quadranten \mathfrak{Q} eine vollständige Stoßmenge ist, da $\mathfrak{Q}^0 \cup \mathfrak{Q}^1 \subseteq \mathfrak{Q}$ gilt. Für eine Dichtefunktion $f : G_n \rightarrow (0, \infty)^{n^2}$ und für jedes Rechteck $r = [z_1, z_2, z_3, z_4] \in R$ definieren wir den zugehörigen Kollisionsoperator $J_r[f, f]$ folgendermaßen:

$$J_r[f, f] = c_r \cdot \pi_r \cdot g(r), \quad (4.51)$$

wobei $c_r > 0$ ist und

$$\pi_r = f(z_1) \cdot f(z_4) - f(z_2) \cdot f(z_3), \quad (4.52)$$

wobei R eine Stoßmenge in G_n ist.

Definition 4.2.2. Für eine Stoßmenge R und eine Dichtefunktion definieren wir den **Kollisionsoperator** $J_R[f, f]$ mit

$$J_R[f, f] = \sum_{r \in R} J_r[f, f]. \quad (4.53)$$

Definition 4.2.3. Als **Kollisionsinvariante** definieren wir die Nichtnullvektoren ϕ , die senkrecht zum Kollisionsoperator zu einer beliebigen Dichtefunktion f sind, d.h.

$$\langle \phi, J_R[f, f] \rangle = 0. \quad (4.54)$$

Man kann leicht sehen, wann ϕ eine Kollisionsinvariante ist, und wenn wir die homo-

gene Boltzmann-Gleichung $\partial_t f = J_R[f, f]$ betrachten, dann gilt

$$\begin{aligned}\partial_t f = J_R[f, f] &\Rightarrow \partial_t \langle \phi, f \rangle = \underbrace{\langle \phi, J_R[f, f] \rangle}_{=0} \\ &\Rightarrow \partial_t \langle \phi, f \rangle = 0 \\ &\Rightarrow \langle \phi, f \rangle = \text{const.}\end{aligned}$$

Dies führt auf die folgende Definition:

Definition 4.2.4. Für jede Kollisionsinvariante ϕ definieren wir die Erhaltungsgröße m_ϕ :

$$m_\phi = \langle f, \phi \rangle.$$

Definition 4.2.5. Die folgenden Mengen werden häufig benutzt:
Der Kernel:

$$\aleph := \text{span} \{ \mathbb{1}, v_x, v_y, \|v\|^2 \}.$$

Für ein Gitter G_n und eine Stoßmenge R definieren wir die Menge:

$$\text{Bild}(J_R) = \{ J_R[f, f] : f \in \mathbb{R}^{|G|} \}.$$

Lemma 4.2.6. Für ein Gitter G_n , wobei $n \geq 3$, und für eine Stoßmenge R gilt:

$$\text{Bild}(J_R) \subseteq \aleph^\perp,$$

und wenn R eine vollständige Stoßmenge ist, dann gilt

$$\text{Bild}(J_R) = \aleph^\perp. \tag{4.55}$$

Beweis: Der Beweis ist einfach und wird dem Leser überlassen.

Hinweis 4.2.7. Im Folgenden möchten wir $\text{Dim}(\text{Bild}(J_R))$ als $\text{Dim}(g(R))$ bezeichnen. D.h.

$$\text{Dim}(\text{Bild}(J_R)) := \text{Dim}(g(R)).$$

4.2.1 Die Gleichgewichtslösung

In diesem Abschnitt möchten wir nach der Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung 4.56 suchen.

$$v \in G_n, \partial_t f(t, v) = J_R[f, f](t, v), \quad f(0, v) = f_0(v), \tag{4.56}$$

wobei $f_0(\cdot) \in (0, \infty)^{n^2}$ der Anfangsdichtevektor (Anfangsdichtefunktion) ist und die Rechteckmenge (die Stoßmenge) $R \neq \emptyset$. Also werden wir im Folgenden die Frage, wie die Dichtefunktion aussieht, wenn $t \rightarrow +\infty$, beantworten.

Definition 4.2.8. Als **Gleichgewichtslösungen** der homogenen Boltzmann-Gleichung 4.56 definieren wir die Vektoren $e \in (0, \infty)^{n^2}$, die folgendes erfüllen

$$J_R[e, e] \equiv 0. \quad (4.57)$$

Als Beispiel geben wir das folgende Lemma an. Hier betrachten wir die Gleichgewichtslage, falls R nur ein Element enthält (Broadwell-Modell).

Lemma 4.2.9. Wir betrachten die Gleichung:

$$\partial_t f(t) = J_r[f(t), f(t)], \quad f(0) = f_0 > 0, \quad (4.58)$$

wobei:

$$J_r[f(t), f(t)] = \pi_r(t) \cdot g(r), \quad \text{mit : } g(r) = \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \\ -1 \\ +1 \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$\pi_r(t) = f_2(t) \cdot f_3(t) - f_1(t) \cdot f_4(t).$$

Sei:

$$\rho = f_1(0) + f_2(0) + f_3(0) + f_4(0), \quad s = \pi_r(0).$$

Dann gilt:

$$f(t) = f(0) + \frac{s}{\rho} (1 - e^{-\rho t}) g(r)$$

und die Gleichgewichtslösungen der Gleichung 4.58 lauten:

$$e_r = f(0) + \frac{s}{\rho} g(r).$$

Außerdem ist:

$$f(t) > 0 : \quad \forall t > 0.$$

Beweis

Gegeben sei das Gitter

$$G = \{z_1 = (0, 0), \quad z_2 = (0, 1), \quad z_3 = (1, 0), \quad z_4 = (+1, +1)\}.$$

Wir betrachten einige Erhaltungsgrößen:

Die Massenerhaltung

$$\begin{aligned}\partial_t (f_1(t) + f_2(t) + f_3(t) + f_4(t)) &= 0 \\ \Rightarrow \boxed{f_1(t) + f_2(t) + f_3(t) + f_4(t) = \text{const} = \rho.}\end{aligned}$$

Die Impulserhaltung

x-Richtung:

$$\begin{aligned}\partial_t (f_2(t) + f_4(t)) &= 0 \\ \Rightarrow \boxed{f_2(t) + f_4(t) = \text{const} = \bar{v}_x.}\end{aligned}$$

y-Richtung:

$$\begin{aligned}\partial_t (f_3(t) + f_4(t)) &= 0 \\ \Rightarrow \boxed{f_3(t) + f_4(t) = \text{const} = \bar{v}_y.}\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\left. \begin{aligned} f_2(t) &= \rho - f_1(t) - \bar{v}_y, \\ f_3(t) &= \rho - f_1(t) - \bar{v}_x, \\ f_4(t) &= -\rho + f_1(t) + \bar{v}_x + \bar{v}_y. \end{aligned} \right\} \Rightarrow \pi(t) = -f_1(t) \rho + \rho^2 - \bar{v}_x \rho - \rho v_y + \bar{v}_x \bar{v}_y$$

$$\Rightarrow \pi_r(t) = -\rho f_1(t) + [f_1(0) + f_2(0)] [f_1(0) + f_3(0)]$$

$$\Rightarrow \pi_r(t) = -\rho [f_1(t) - f_1(0)] + s.$$

Die Lösung der linearen gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\partial_t f_1(t) = \pi_r(t) = -\rho [f_1(t) - f_1(0)] + s$$

ist:

$$f_1(t) = f_1(0) + \frac{s}{\rho} (1 - e^{-\rho t}).$$

Dann ist die Lösung der Gleichung 4.58

$$\boxed{f(t) = f(0) + \frac{s}{\rho} (1 - e^{-\rho t}) g(r) \quad \underbrace{\qquad\qquad}_{> 0} \quad .}$$

Den Beweis dieses Teils überlassen wir dem Leser.

Außerdem ist:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = f(0) + \frac{s}{\rho} g(r),$$

und man kann auch leicht sehen, dass:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \pi_r(t) = 0. \quad \square$$

Das Lemma 4.2.9 hat gezeigt, dass die Lösung der Boltzmann-Gleichung mit einer Enelement-Stoßmenge durch die Lösung einer linearen gewöhnlichen Differentialgleichung berechnet werden kann. Das ist im Allgemeinen nicht möglich, wenn die Stoßmenge mehrere Elemente hat. Um die Gleichgewichtslösung der Boltzmann-Gleichung zu finden, werden wir die H – Funktion definieren und dann den H – Satz anwenden. Wir haben in Lemma 4.2.9 bewiesen, dass die Lösung der Broadwell-Modell strikt-positive ist. Im Folgenden nehmen wir an, dass die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung 4.56 strikt positive ist, d.h. $f(t) > 0$.

Definition 4.2.10. Die Funktion $H(t)$ ist folgendermaßen definiert:

$$H(t) = \langle f(t), \ln(f(t)) \rangle, \quad (4.59)$$

wobei $f(t)$ die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung 4.56 ist.

Lemma 4.2.11. H -Theorem Die Funktion $H(t)$ ist eine monoton fallende Funktion, d.h. $\frac{d}{dt} H(t) \leq 0$, und die Gleichheitszeichen gelten genau dann, wenn $J_r[f, f] \equiv 0 \quad \forall r \in R$.

Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(t) &= \langle \mathbb{1} + \ln(f), \partial_t f \rangle = \langle \ln(f), J_R[f, f] \rangle = \sum_{r=[z_1, \dots, z_4] \in R} \pi_r \cdot \langle \ln(f), g(r) \rangle \\ &= \sum_{r=[z_1, \dots, z_4] \in R} (f_{z_2} f_{z_3} - f_{z_1} f_{z_4}) \cdot [\ln(f_{z_1}) - \ln(f_{z_2}) - \ln(f_{z_3}) + \ln(f_{z_4})] \\ &= \sum_{r=[z_1, \dots, z_4] \in R} f_{z_2} f_{z_3} \cdot \left(1 - \frac{f_{z_1} f_{z_4}}{f_{z_2} f_{z_3}}\right) \cdot \ln\left(\frac{f_{z_1} f_{z_4}}{f_{z_2} f_{z_3}}\right) \leq 0, \end{aligned}$$

da $(1 - x) \ln(x) \leq 0$ ist für $x \in \mathbb{R}_+$ und als einzige Nullstelle den Wert $x = 1$ hat.

D.h. $\langle \ln(f), J_R[f, f] \rangle = 0$ nur wenn $J_r[f, f] \equiv 0, \forall r \in R$ und es folgt dass $J_R[f, f] \equiv 0$.

\square

Bemerkungen und Ergebnisse 4.2.12. 1. $e \in (0, \infty)^{n^2}$ ist eine Gleichgewichtslösung der Gleichung 4.56, falls $\ln(e)$ eine Kollisionsinvariante ist.

2. **Vollständiges Modell:** Falls $\text{Dim}(g(R)) = n^2 - 4$ ist, so gilt, dass eine Gleichgewichtslösung durch

$$e(v) = \exp(a + b_x \cdot v_x + b_y \cdot v_y + c \cdot |v|^2) \quad (4.60)$$

mit $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ dargestellt werden kann. Hiermit ergeben sich die Erhaltungsgrößen:

$$\rho = \langle \mathbb{1}, e \rangle, \quad \rho \bar{v}_x = \langle V_x, e(v) \rangle, \quad \rho \bar{v}_y = \langle V_y, e(v) \rangle, \quad \rho T = \frac{1}{2} \langle V_x^2 + V_y^2, e \rangle. \quad (4.61)$$

Die Gleichgewichtslösung für eine vollständige Stoßmenge lässt sich in der Form

$$e(v) = A \cdot e^{-c[(v_x - \alpha)^2 + (v_y - \beta)^2]} \quad (4.62)$$

darstellen. Dabei sind $A, c, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$ und $A, c > 0$. Die Parameter A, c, α, β können durch

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{1}, f_0 \rangle &= \langle \mathbb{1}, e \rangle, \\ \langle V_x, f_0 \rangle &= \langle V_x, e \rangle, \\ \langle V_y, f_0 \rangle &= \langle V_y, e \rangle, \\ \langle v^2, f_0 \rangle &= \langle v^2, e \rangle. \end{aligned} \quad (4.63)$$

berechnet werden, wobei f_0 der Anfangswert der Gleichung 4.56 ist.

3. **Unvollständiges Modell:** In diesem Abschnitt untersuchen wir die Lösung der homogenen Boltzmann Gleichung 4.56 auf dem Gitter G_n unter einer Stoßmenge R mit $\text{Dim}(g(R)) = (n^2 - 4) - k$, wobei $k \in \mathbb{N}$. Dann existieren die Vektoren $\varphi_1, \dots, \varphi_k$, wobei $\{\varphi_1, \dots, \varphi_k\} \perp g(R)$ gilt, und $\{\varphi_1, \dots, \varphi_k\} \cup \{\mathbb{1}, V_x, V_y, |V|^2\}$ eine linear unabhängige Menge ist. Nach dem Satz 4.2.11 konvergiert die Lösung der Gleichung 4.56 (wenn die Lösung mit der Zeit strikt positiv bleibt) gegen ihre Gleichgewichtslösung $e(v)$, wobei $J_r[e, e] = 0, \forall r \in R$ gilt. Außerdem ist $\ln(e) \perp g(R)$. Daraus folgt, dass:

$$\ln(e) \in \text{span} \{ \mathbb{1}, V_x, V_y, |V|^2, \varphi_1, \dots, \varphi_k \}. \quad (4.64)$$

Die Gleichgewichtslösung für diese unvollständige Stoßmenge lässt sich in der Form

$$e(v) = e^{[a + b_1 v_x + b_2 v_y + c(v_x^2 + v_y^2)]} \cdot e^{\left[\sum_{i=1}^k \alpha_i \varphi_i(v) \right]} \quad (4.65)$$

darstellen. Die Parameter a, b_1, b_2, c, α_i , mit $i = 1, \dots, k$, können durch folgende

Erhaltungsgrößen berechnet werden.

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbb{1}, f_0 \rangle &= \langle \mathbb{1}, e \rangle, \\
 \langle v_x, f_0 \rangle &= \langle v_x, e \rangle, \\
 \langle v_y, f_0 \rangle &= \langle v_y, e \rangle, \\
 \langle v^2, f_0 \rangle &= \langle v^2, e \rangle. \\
 \langle \varphi_i, f_0 \rangle &= \langle \varphi_i, e \rangle \quad \text{mit } i = 1, \dots, k.
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

Die nicht physikalischen Kollisionsinvarianten $\{\varphi_1, \dots, \varphi_k\}$ verursachen durch $\Phi(v) = e^{\left[\sum_{i=1}^k \alpha_i \varphi_i(v) \right]}$ die Verformung der Gleichgewichtslösung.

Beispiele

1. Als erstes möchten wir ein vollständiges und ein unvollständiges Stoßmodell in G_n , $n > 3$, vergleichen. Als Beispiel definieren wir die Stoßmengen R_1, R_2 durch

$$R_1 = (\mathfrak{Q}^0 \cup \mathfrak{Q}^1), \quad R_2 = R_1 - \{\dot{q}\}, \tag{4.67}$$

mit

$$\dot{q} = [2, n+1, n+3, 2n+2] + n(n-3), \tag{4.68}$$

wobei $\mathfrak{Q}^0, \mathfrak{Q}^1$ in 4.1.1 definiert sind. Wir haben schon bewiesen, dass $\dim(g(R_1)) = n^2 - 4$, d.h. dass R_1 eine vollständige Stoßmenge ist, und R_2 eine unvollständige Stoßmenge ist, weil $\dim(g(R_2)) = n^2 - 5$ gilt. Wir wissen schon, dass $\mathbb{1}, V_x, V_y$ und V^2 Kollisionsinvarianten für J_{R_1} und J_{R_2} sind, aber für J_{R_2} existiert noch eine Kollisionsinvariante $\varphi_{\dot{q}}$, die linear unabhängig von $\mathbb{1}, V_x, V_y$ und V^2 ist.

Wir nutzen jetzt eine Methode, um $\varphi_{\dot{q}}$ zu berechnen. Die ersten $n(n-1)$ Komponenten (ersten $(n-1)$ Zeilen) des Vektors $\varphi_{\dot{q}}$ können mit Hilfe von vier bestimmten bekannten Stellen von $\varphi_{\dot{q}}$ berechnet werden, siehe 4.1.4(c,d). Das Problem liegt in den letzten n Komponenten von $\varphi_{\dot{q}}$, da kein Element der letzten Zeile durch die $(n-1)$ vorhergehenden Zeilen berechnet werden kann, da \dot{q} fehlt. Um $\varphi_{\dot{q}}$ in den letzten n Komponenten (für die n -te Zeile) zu berechnen, benötigen wir einen Wert von $\varphi_{\dot{q}}$ in der letzten Zeile. Eine Möglichkeit besteht darin, die vier bestimmten Stellen als 0, und einen Wert in der letzten Zeile 1, zu wählen. Dann ist $\varphi_{\dot{q}}$ in den ersten $n(n-1)$ Stellen 0, und 1 in letzten n Stellen.

$$\varphi_{\dot{q}} = \begin{bmatrix} \underbrace{n(n-1) \text{ Mal}}_{0 \dots 0} & \underbrace{n \text{ Mal}}_{1 \dots 1} \end{bmatrix}^T. \quad (4.69)$$

Bemerkungen

- $\{\varphi_{\dot{q}}, \mathbb{1}, V_x, V_y, V^2\}$ ist eine linear unabhängige Menge, da $\{\mathbb{1}, V_x, V_y, V^2\}$ in $G_{(n-1) \times (n-1)}$ linear unabhängig ist.
- Für $m > n-3$ definieren wir $R_2^m = R_1 - \{\dot{q}_k = \dot{q} - n \cdot k, k \in \{0, \dots, (m-1)\}\}$. Dann ist die Basis von $(g(R_2^m))^\perp$:

$$\aleph^m = \{\mathbb{1}, V_x, V_y, |V|^2, \varphi_{\dot{q}}^k : k \in \{0, \dots, (m-1)\}\} \quad (4.70)$$

mit

$$\varphi_{\dot{q}}^k = \begin{bmatrix} \underbrace{n(n-k-1) \text{ Mals}}_{0 \dots 0} & \underbrace{n \text{ Mals}}_{1 \dots 1} & \underbrace{n \cdot k \text{ Mals}}_{0 \dots 0} \end{bmatrix}^T. \quad (4.71)$$

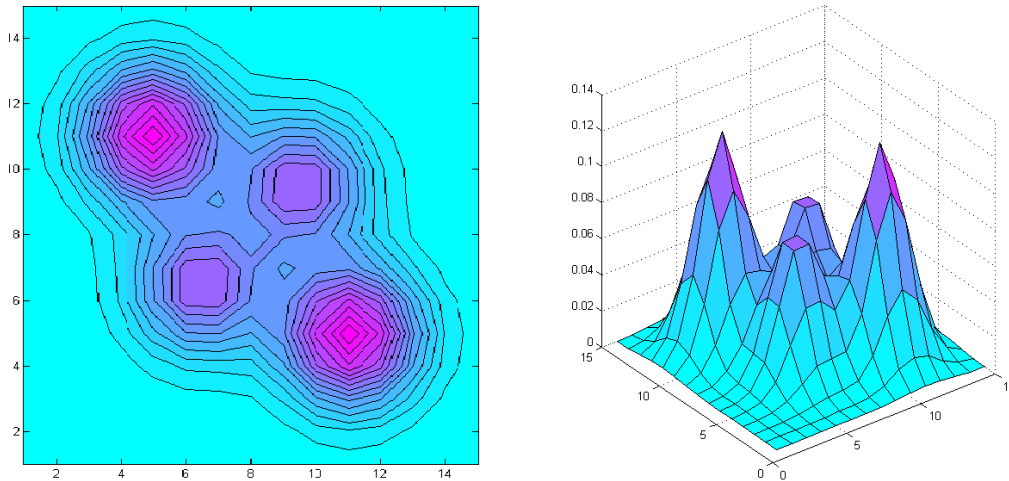


Abbildung 4.14: Anfangsverteilung im Gitter $G_{15 \times 15}$

Die Gleichgewichtslösung der homogenen Gleichung $\partial_t f(t, v) = J_{R_2^m} [f, f]$ ist eine Maxwell-Verteilung, aber die Werte der obigen m-Zeilen werden jeweils mit einer zugehörigen Konstanten multipliziert.

In der Abbildung 4.14 sieht man die Anfangswerte $f_0(v)$ im Gitter $G_{15 \times 15}$ und in der Abb. 4.15 wird die Lösung der Gleichung $\partial_t f(t, v) = J_{R_1} [f, f]$ mit dem

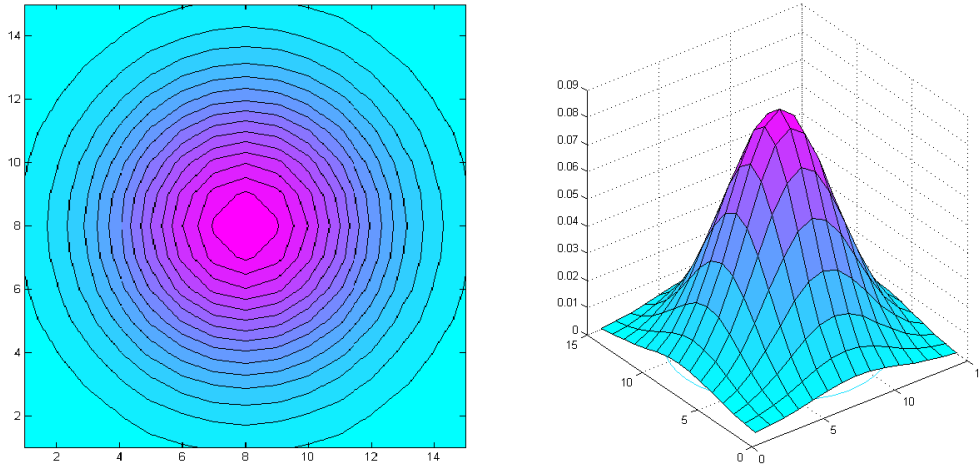


Abbildung 4.15: Die Gleichgewichtslösung für eine vollständige Stoßmenge

Anfangswert $f(0, v) = f_0(v)$ nach 1000-Zeitschritten dargestellt. Die Abbildung 4.16 zeigt die Lösung der Gleichung $\partial_t f(t, v) = J_{R_2^3}[f, f]$ unter denselben Anfangsbedingungen und gleichen Zeitschritten. Man kann eine Verformung der Maxwellfunktion in den oberen 3-Zeilen (also von 12 bis 15) sehen.

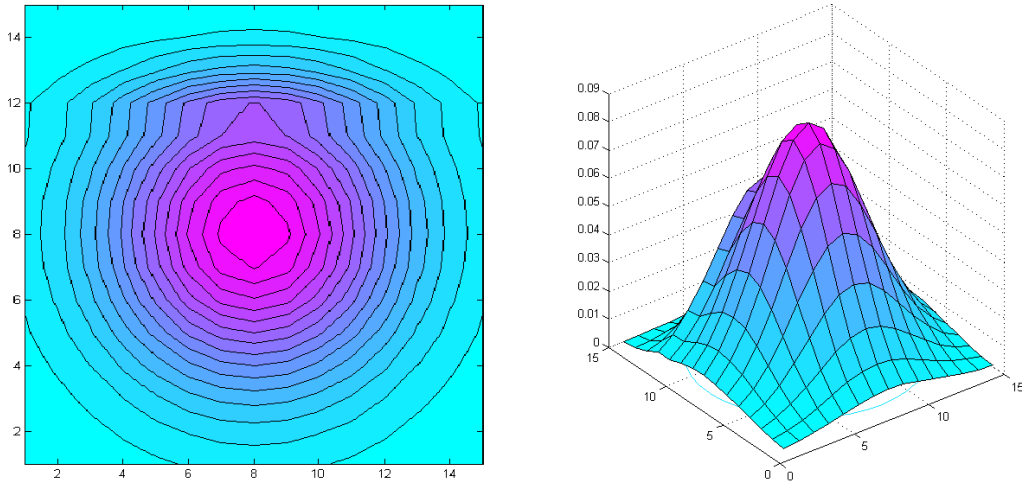


Abbildung 4.16: Die Gleichgewichtslösung für eine unvollständige Stoßmenge

2. Die Menge von Quadraten, deren Seiten die Größe $\sqrt{2}$ haben und deren Mittelpunkte auf der j -te Zeile liegen, nennen wir Z_j , siehe Abb. 4.17. Ebenso definieren wir die Quadrate S_i , deren Seiten die Größe $\sqrt{2}$ haben und deren Mittelpunkte

auf der i -ten Spalte liegen. Man kann Z_j, S_i durch

$$\begin{aligned} Z_j &= \{q = q_0^1 + k + (j-1) \cdot n, \quad k \in \{0, \dots, (n-3)\}\}, \\ S_i &= \{q = q_0^1 + (i-1) + k \cdot n, \quad k \in \{0, \dots, (n-3)\}\}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

darstellen.

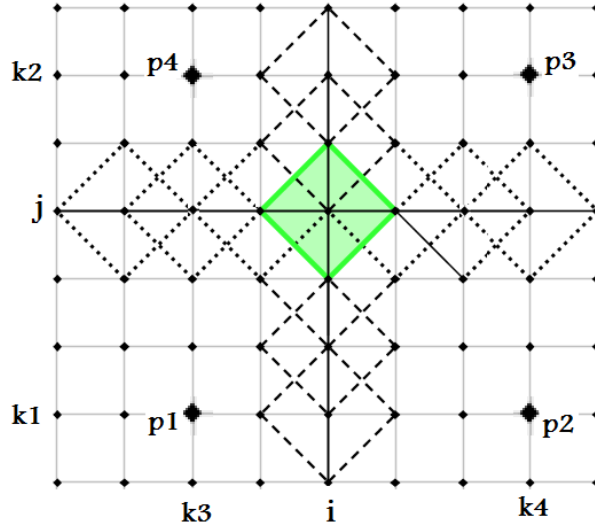


Abbildung 4.17: Eine vollständige Rechteckmenge

Die beiden Mengen Z_j, S_i haben ein gemeinsames Quadrat $q_{i,j}^1 = q_0^1 + (i-1) + (j-1) \cdot n$, d.h.

$$Z_j^1 \cap S_i^1 = \{q_{i,j}^1\}.$$

Wir definieren die Rechteckmenge (bzw. Quadratmenge) $R_{i,j} = \mathfrak{Q}^0 \cup Z_j^1 \cup S_i^1$. Diese Menge hat folgende Eigenschaften

- $R_{i,j}$ ist eine vollständige Stoßmenge, weil $\dim \{g(R_{i,j})\} = (n^2 - 4)$. Der Beweis ist analog zum Beweis von Lemma 4.1.3. Daraus folgt, dass die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung, die $J_{R_{i,j}}$ als Stoßoperator hat, gegen eine Maxwell-Verteilung konvergiert.
- Für $k_1, k_2, k_3, k_4 \in \{1, \dots, n\}$, wobei $k_1 < j < k_2$ und $k_3 < i < k_4$, definieren wir hier die Menge A aller Elemente von $Z_j \cup S_i$, deren Knoten vollständig in dem Rechteck $p_1 p_2 p_3 p_4$ liegen, wobei $p_1 = (k_3, k_1)$, $p_2 = (k_3, k_2)$, $p_3 =$

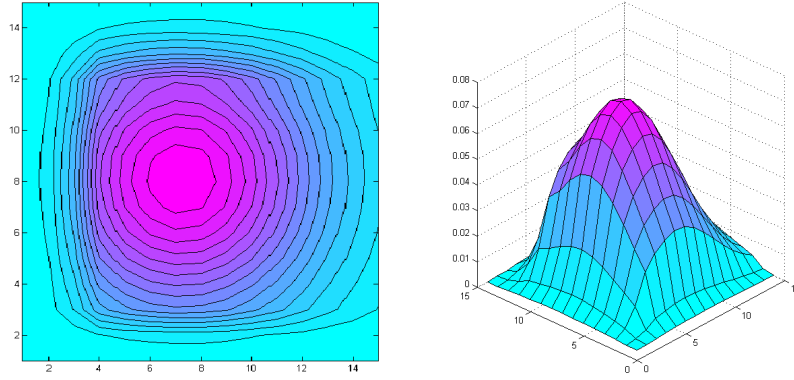


Abbildung 4.18: Gleichgewichtsverteilung für das unvollständige Modell

(k_4, k_2) und $p_4 = (k_4, k_1)$, siehe Abb. 4.17. Danach wählen wir die Stoßmenge

$$R_{i,j}(k_1, k_2, k_3, k_4) = \mathfrak{Q}^0 \cup A.$$

Jedes Element $q \in (R_{i,j} - R_{i,j}(k_1, k_2, k_3, k_4)) \cap Z_j$ entspricht einer künstlichen Kollisionseinvariante φ , die überall Null ist außer in den Punkten der Spalten $k + 1$ mit $k > i$ und $k - 1$ (für $k < i$). Analog verhält es sich mit $q \in (R_{i,j} - R_{i,j}(k_1, k_2, k_3, k_4)) \cap S_i^1$. Hierzu gibt es eine zugehörige Kollisionseinvariante, deren Komponenten in der entsprechenden Zeile alle 1 sind und sonst 0. Es folgt, dass die Form der Gleichgewichtslösung der homogenen Boltzmann-Gleichung, mit dem Stoßoperator $J_{R_{i,j}(k_1, k_2, k_3, k_4)}$, eine verformte Maxwell-Funktion ist, so dass jede Spalte der ersten $(k_3 - 1)$ Spalten und die letzten $(n - k_4)$ Spalten mit einer konstanten Zahl multipliziert wird. Ebenso verhält es sich mit den ersten $(k_1 - 1)$ Zeilen und den letzten $(n - k_4)$ Zeilen. Abb. 4.18 zeigt die Gleichgewichtslösung der homogenen Boltzmann-Gleichung für den Stoßoperator $J_{R_{i,j}(k_1, k_2, k_3, k_4)}$ mit $i = j = 7$, $k_1 = 4$, $k_2 = 15$, $k_3 = 2$, $k_4 = 11$. Unser Gitter ist $G_{15 \times 15}$ mit denselben Anfangswerten wie im letzten Beispiel (Abb. 4.15(a)).

Das folgende Lemma ist ein weiteres Beispiel für unvollständige Modelle.

Lemma 4.2.13. *Für das Gitter G_n , $n > 5$, sei $f(t, v)$ die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung*

$$\partial_t f(t, v) = J_{\mathfrak{Q}^0}[f, f], \quad f(0, v) = f_0(v). \quad (4.73)$$

1. Die Größen $mz_k(t)$, $ms_k(t)$, $k = 1, \dots, n$, sind Erhaltungsgrößen, wobei

$$\begin{aligned} ms_k(t) &= \sum_{m=1}^n f(t, \underbrace{(m, k)^T}_v) \\ mz_k(t) &= \sum_{m=1}^n f(t, \underbrace{(k, m)^T}_v). \end{aligned} \quad (4.74)$$

2. Für eine Menge von Geraden $S = \{s_i : s_i \parallel y\text{-Achse}, i = 1, \dots, N_1\}$ und die Geradenmenge $Z = \{z_j : z_j \parallel x\text{-Achse}, j = 1, \dots, N_2\}$, ist die Funktion

$$e(v) = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \underbrace{a_i \cdot e^{(-\alpha|v-p_{ij}|^2)}}_{e_{p_{ij}}(v)} \quad (4.75)$$

eine Gleichgewichtslösung der Gleichung 4.73, wobei $a_i, \alpha \in \mathbb{R}^+$ und die Punkte $p_{ij} = s_i \cap z_j$ sind.

3. Sei $\bar{v}_1 := (a_1, b_1)$, $a_1, b_1 \in \mathbb{R}$ und $\bar{v}_2 := (a_2, b_2)$, $a_2, b_2 \in \mathbb{R}$ mit $\bar{v}_1 + \bar{v}_2 = (o_x, o_y)$, d.h. \bar{v}_1, \bar{v}_2 seien symmetrisch bezüglich des Mittelpunkts (o_x, o_y) des Gitters G_n . Dann ist die Gleichgewichtslösung der Gleichung 4.73 mit dem Anfangswert

$$f_0(v) = e^{-\alpha \cdot |v - \bar{v}_1|^2} + e^{-\alpha \cdot |v - \bar{v}_2|^2} \quad (4.76)$$

gegeben durch:

$$e(v) = \frac{1}{2} \left(\underbrace{e^{-\alpha \cdot |v - \bar{v}_1|^2}}_{e_1(v)} + \underbrace{e^{-\alpha \cdot |v - \bar{v}_2|^2}}_{e_2(v)} + \underbrace{e^{-\alpha \cdot |v - \bar{v}_3|^2}}_{e_3(v)} + \underbrace{e^{-\alpha \cdot |v - \bar{v}_4|^2}}_{e_4(v)} \right), \quad (4.77)$$

wobei $\alpha \in \mathbb{R}^+$, $v_3 = (a_1, b_2)$ und $v_4 = (a_2, b_1)$.

Beweis

1. Die Kollisionsinvarianten von $J_{R_{2,2}(1,3,1,3)}$ sind auch Kollisionsinvarianten von $J_{\mathfrak{Q}^0}$, weil \mathfrak{Q}^0 eine Teilmenge von $R_{2,2}(1,3,1,3)$ ist. Daraus folgt, dass $mz_k(t)$, $ms_k(t)$, $k = 4, \dots, n$, Erhaltungsgrößen sind. Ebenso folgt, dass $mz_k(t)$, $ms_k(t)$, $k = 1, \dots, n-3$, erhalten werden, weil die Kollisionsinvarianten von $J_{R_{(n-1),(n-1)}((n-2),n,(n-2),n)}$ auch Kollisionsinvarianten von $J_{\mathfrak{Q}^0}$ sind, weil \mathfrak{Q}^0 eine Teilmenge von $R_{(n-1),(n-1)}((n-2),n,(n-2),n)$ ist. \square

2. Zu $\forall q = g_1 g_2 g_3 g_4 \in \mathfrak{Q}^0$ möchten wir beweisen, dass $J_q[e, e] = 0$. Sei $a_1 a_2 a_3 a_4$ ein Rechteck, wobei $a_k \in \left\{ p_{ij}, \begin{array}{l} i = 1, \dots, N_1 \\ j = 1, \dots, N_2 \end{array} \right\}$ und schreiben wir $e_k(\cdot) = e_{a_k}(\cdot)$ für $k = 1, 2, 3, 4$ als Abkürzung. Zuerst wissen wir, dass der Operator $J_q[\cdot, \cdot]$ ein bilinear Operator ist. Außerdem ist $J_q[e_k, e_k] = 0$, $k = 1, 2, 3, 4$, und

$$J_q[e_i, e_j] = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} [e_i(g_1) \cdot e_j(g_3) + e_j(g_1) \cdot e_i(g_3)] - \\ [e_i(g_2) \cdot e_j(g_4) + e_j(g_2) \cdot e_i(g_4)] \end{array} \right). \quad (4.78)$$

Aus der Abb. 4.19 lässt sich ableiten, dass:

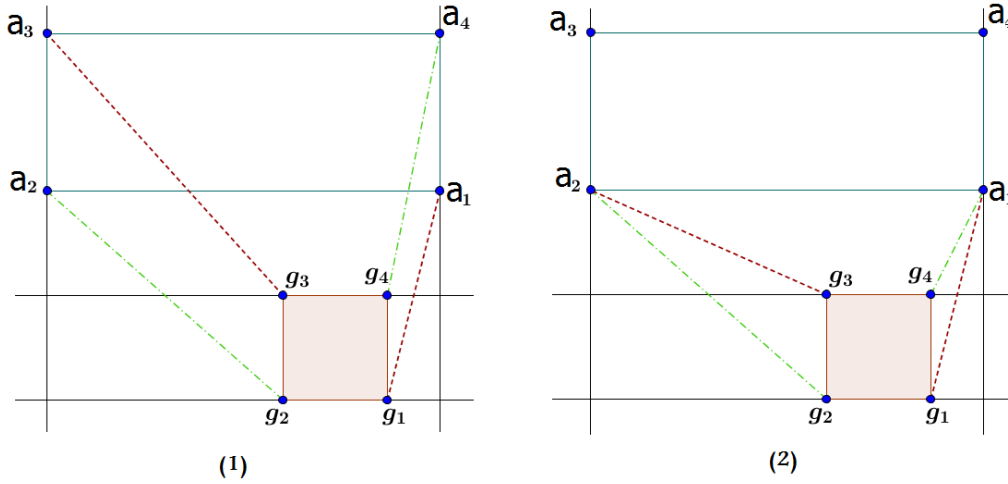


Abbildung 4.19: Unphysikalische Gleichgewichtslage $e(v)$

$$\left. \begin{array}{l} |g_1 - a_1|^2 + |g_3 - a_2|^2 = |g_4 - a_1|^2 + |g_2 - a_2|^2 \\ \Rightarrow e_1(g_1) \cdot e_2(g_3) = e_1(g_2) \cdot e_2(g_4) \\ |g_3 - a_1|^2 + |g_1 - a_2|^2 = |g_2 - a_1|^2 + |g_4 - a_2|^2 \\ \Rightarrow e_2(g_1) \cdot e_1(g_3) = e_2(g_2) \cdot e_1(g_4) \end{array} \right\} \Rightarrow J_q[e_1, e_2] = 0.$$

Das können wir verallgemeinern, so dass $J_q[e_i, e_j] = 0$ gilt, wenn die Gerade $\overleftrightarrow{z_i z_j}$ parallel mit einer Achse ist. Das bedeutet

$$J_q[e_1, e_2] = 0, J_q[e_2, e_3] = 0, J_q[e_3, e_4] = 0, J_q[e_4, e_1] = 0.$$

Außerdem lässt sich aus der Abb. 4.19 ableiten, dass

$$\left. \begin{aligned} |g_1 - a_1|^2 + |g_3 - a_3|^2 &= |g_2 - a_2|^2 + |g_4 - a_4|^2 \\ |g_1 - a_3|^2 + |g_3 - a_1|^2 &= |g_2 - a_4|^2 + |g_4 - a_2|^2 \\ |g_1 - a_2|^2 + |g_3 - a_4|^2 &= |g_2 - a_1|^2 + |g_4 - a_3|^2 \\ |g_1 - a_4|^2 + |g_3 - a_2|^2 &= |g_4 - a_1|^2 + |g_2 - a_3|^2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow J_q[e_1, e_3] + J_q[e_2, e_4] = 0.$$

Das bedeutet, dass $J_q[e, e] = 0$ gilt. Somit ist e eine Gleichgewichtslösung. \square

3. Aufgrund der Symmetrieeigenschaften gilt, dass

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{1}, e_1 \rangle &= \langle \mathbb{1}, e_2 \rangle = \langle \mathbb{1}, e_3 \rangle = \langle \mathbb{1}, e_4 \rangle \Rightarrow \\ \langle \mathbb{1}, e \rangle &= \langle \mathbb{1}, f_0 \rangle = \rho \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} &\left. \begin{aligned} \langle V_x, e_1 \rangle &= \langle V_x, e_3 \rangle, \quad \langle V_x, e_2 \rangle = \langle V_x, e_4 \rangle \\ \langle V_y, e_1 \rangle &= \langle V_y, e_4 \rangle, \quad \langle V_y, e_2 \rangle = \langle V_y, e_3 \rangle \end{aligned} \right\} \\ &\Rightarrow \left\langle \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix}, e \right\rangle = \left\langle \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix}, f_0 \right\rangle = \rho \begin{pmatrix} o_x \\ o_y \end{pmatrix}, \\ &\langle |V|^2, e_1 \rangle = \langle |V|^2, e_2 \rangle = \langle |V|^2, e_3 \rangle = \langle |V|^2, e_4 \rangle \Rightarrow \\ &\langle |V|^2, e \rangle = \langle |V|^2, f_0 \rangle. \end{aligned}$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^n [e_1(v(x, y)) + e_2(v(x, y))] &= \sum_{x=1}^n [e_3(v(x, y)) + e_4(v(x, y))] \\ \sum_{y=1}^n [e_1(v(x, y)) + e_2(v(x, y))] &= \sum_{y=1}^n [e_3(v(x, y)) + e_4(v(x, y))], \end{aligned}$$

woraus die Gültigkeit von 1 folgt. Das bedeutet, dass $e(v)$ die Gleichgewichtslösung ist. \square

In der Abb. 4.20 wird der Übergang von einer Nichtgleichgewichtslösung zu einer Gleichgewichtslösung der Gleichung 4.73 dargestellt. Abb. 4.21 zeigt den Verlauf der H-Funktion und die Norm des Kollisionsoperators. Die H-Funktion konvergiert gegen ihr Minimum und $\|J[f, f]\| = \langle \mathbb{1}, |J| \rangle$ konvergiert gegen Null, wenn die Lösung der

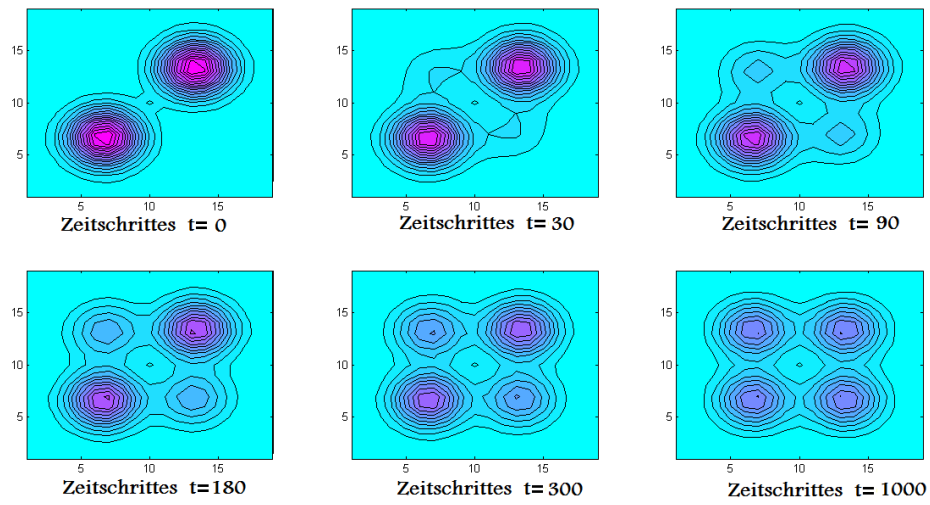


Abbildung 4.20: Übergang einer Nichtgleichgewichtslösung zu einer Gleichgewichtslösung

homogene Boltzmann-Gleichung sich ihrer Gleichgewichtslage nähert.

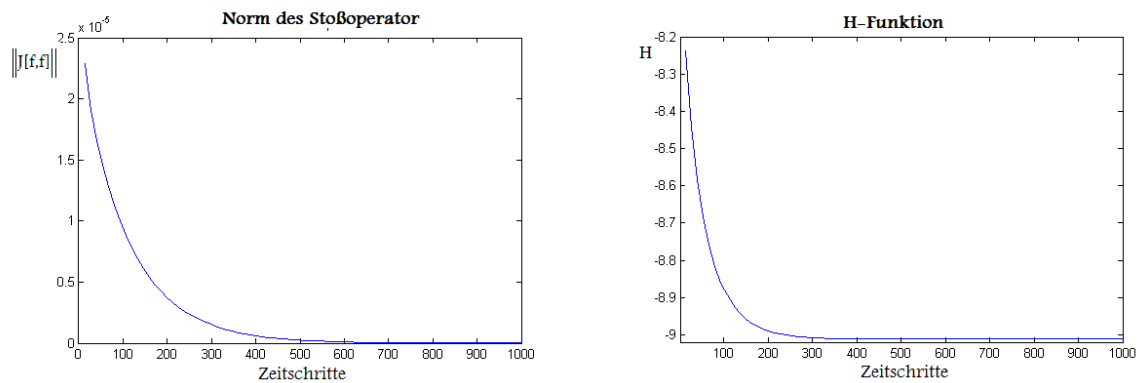


Abbildung 4.21: H-Funktion und Norm des Stoßoperator

4.3 Diskretisierung im \mathbb{R}^3

Nun betrachten wir die homogene Boltzmann-Gleichung auf einem dreidimensionalen diskretisierten Geschwindigkeitsraum. Wie in 4.1 werden wir zuerst die endliche Knotenmenge definieren:

$$G_n = \{0, \dots, (n-1)\}^3 : n \in \mathbb{N}^*, n > 2. \quad (4.79)$$

\mathfrak{R} sei die Menge aller Rechtecke, die auf G_n liegen, \mathfrak{Q} sei die Menge aller Quadrate. Die Funktion $g : \mathfrak{R} \rightarrow \{-1, 0, 1\}^{n^3}$ sei gegeben wie in der Definition 4.1.1. Also:

$$\begin{aligned} g : \mathfrak{R} &\rightarrow \{-1, 0, 1\}^{n^3}, \\ g(r) &= e_{z_1} - e_{z_2} - e_{z_3} + e_{z_4}, \end{aligned} \quad (4.80)$$

wobei $r = [z_1, z_2, z_3, z_4]$ und $e_{z_1}, e_{z_2}, e_{z_3}, e_{z_4}$ kanonische Einheitsvektoren des \mathbb{R}^{n^3} sind. Weiterhin sei:

$$\mathfrak{N} = \text{span} \left\{ 1, v_x, v_y, v_z, \frac{\|v\|^2}{2} \right\}. \quad (4.81)$$

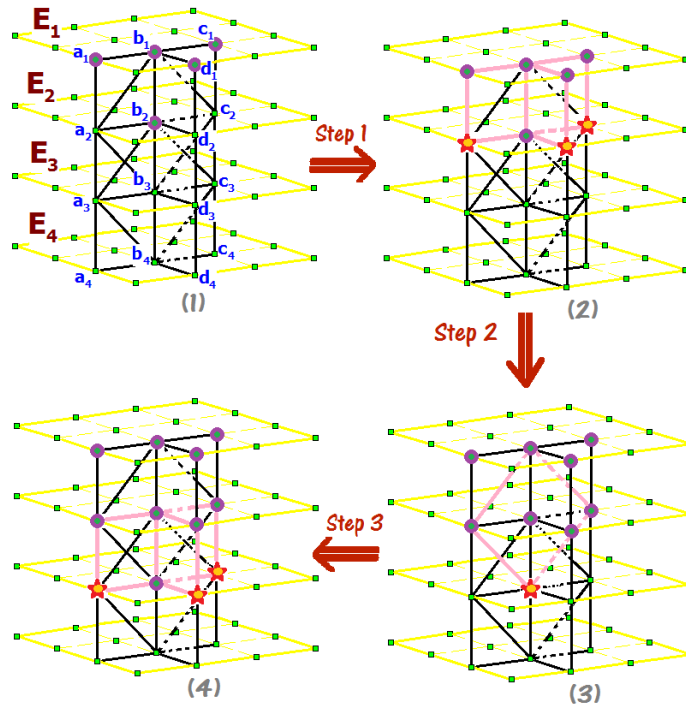


Abbildung 4.22: Entwicklung einer Stoß-Invariante.

Lemma 4.3.1.

1. $\aleph \subseteq g(\aleph)^\perp$.
2. Es gibt $x_1, \dots, x_5 \in G_n : \phi \in g(\aleph)^\perp$ eindeutig bestimmt durch $\phi(x_i), i = 1, \dots, 5$.
3. Es ist

$$\text{rank}(g(\aleph)) = n^3 - 5. \quad (4.82)$$

Beweis

1. Der Beweis dieses Teils ist analog zu 4.2.6. Das liefert

$$\text{rank}(g(\aleph)^\perp) \geq 5, \quad \text{oder} \quad \text{rank}(g(\aleph)) \leq n^3 - 5. \quad (4.83)$$

2. Wir beweisen 2 für folgenden Spezialfall (Das wird die Verallgemeinerung nicht beeinträchtigen).

In Abbildung 4.22-(1) sind vier Ebenen E_1, E_2, E_3, E_4 zu sehen, die parallel zur xy -Ebene sind. φ nimmt man an den fünf Stellen a_1, b_1, c_1, d_1 und b_2 . Die Frage lautet, welche Rechtecke bzw. Quadrate wichtig sind, um φ überall zu berechnen. Der Algorithmus, um diese Menge von Rechtecken zu finden, wird durch folgende Schritte beschrieben:

- a) φ ist an den vier Stellen a_1, b_1, c_1, d_1 bekannt. Aus 4.1.4-(d) kann φ überall auf E_1 berechnet werden, wenn wir die Basismenge von Quadrat \hat{Q}_{E_1} , die aus $n^2 - 4$ Quadrate besteht, benutzen.
- b) Durch Anhängen der Quadrate $a_1b_1b_2a_2, c_1b_1b_2c_2$ und $d_1b_1b_2d_2$ wird φ an den Stellen a_2, c_2, d_2 berechnet, siehe 4.22-(2). Wenn wir die Basismenge \hat{Q}_{E_2} benutzen, kann φ überall auf E_2 ermittelt werden.
- c) Um φ auf E_3 zu berechnen, brauchen wir die Kenntnis von 4 Stellen z.B. a_3, b_3, c_3, d_3 . φ_{b_3} kann durch das Quadrat $b_1a_2c_2b_3$ berechnet werden, siehe 4.22-(3).
- d) Die Stellen a_3, c_3, d_3 kann man ähnlich wie im zweiten Schritt berechnen; unter Verwendung von \hat{Q}_{E_3} wird φ auf E_3 berechnet.

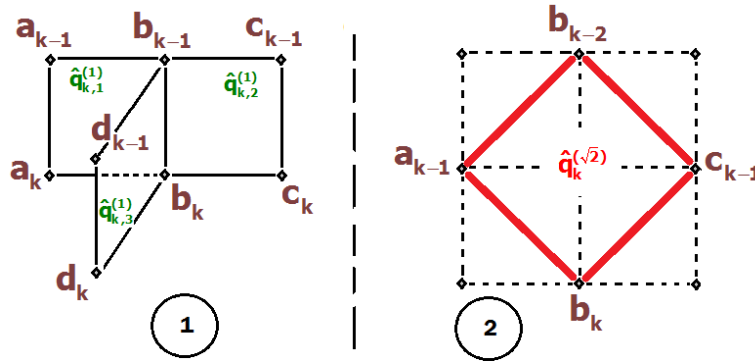


Abbildung 4.23: Die Darstellung der Quadrate $q_{k,i}^{(1)}$, $q_k^{(\sqrt{2})}$

Daraus folgt, dass

$$\text{rank}(g(\mathfrak{R})^\perp) \leq 5, \quad \text{rank}(g(\mathfrak{R})) \geq n^3 - 5. \quad (4.84)$$

3. Aus 4.83 und 4.84 folgt:

$$|g(\mathfrak{R})^\perp| = 5, \quad |g(\mathfrak{R})| = n^3 - 5. \quad \square \quad (4.85)$$

Zusammenfassung:

Wir wissen schon, dass für jede Ebene E parallel zur xy -Ebene eine vollständige Menge (Basismenge) von Quadraten existiert, z. B. beschreibt Bild 4.4 eine Basismenge. Die Basismenge für diese Ebene nennen wir \hat{Q}_E . Die Vereinigung aller Basismengen \hat{Q}_E nennen wir \hat{Q}_{xy} .

$$|\hat{Q}_{xy}| = n(n^2 - 4). \quad (4.86)$$

Wenn wir die Funktion $\varphi \in \mathbb{N}$ an vier bestimmten Stellen jeder Ebene kennen, die parallel zur xy -Ebene ist, so ist φ überall bekannt.

Die Menge aller Quadrate, die wir nach der obigen Methode benötigen, um φ über G_n zu berechnen, sind:

$$\hat{Q} = \left(\bigcup_{k=1}^n \hat{Q}_{E_k} \right) \cup \left(\bigcup_{k=2}^n \{ \hat{q}_{k,1}^{(1)}, \hat{q}_{k,2}^{(1)}, \hat{q}_{k,3}^{(1)} \} \right) \cup \left(\bigcup_{k=3}^n \{ \hat{q}_k^{(\sqrt{2})} \} \right), \quad (4.87)$$

wobei die Quadrate $q_{k,i}^{(1)}$, $q_k^{(\sqrt{2})}$ im Bild 4.23 dargestellt sind, und

$$\hat{q}_{k,1}^{(1)} \quad \text{das Quadrat } a_{k-1}b_{k-1}b_ka_k \text{ ist,}$$

$$\begin{aligned}\hat{q}_{k,2}^{(1)} & \text{ das Quadrat } c_{k-1}b_{k-1}b_kc_k \text{ ist,} \\ \hat{q}_{k,3}^{(1)} & \text{ das Quadrat } d_{k-1}b_{k-1}b_kd_k \text{ ist und} \\ \hat{q}_k^{(\sqrt{2})} & \text{ das Quadrat } b_{k-2}a_{k-1}c_{k-1}b_k \text{ ist.}\end{aligned}$$

Aus 4.87 folgt

$$\begin{aligned}|\hat{Q}| &= \sum_{k=1}^n |\hat{Q}_{E_k}| + \left| \left(\bigcup_{k=2}^n \{ \hat{q}_{k,1}^{(1)}, \hat{q}_{k,2}^{(1)}, \hat{q}_{k,3}^{(1)} \} \right) \right| + \left| \left(\bigcup_{k=3}^n \{ \hat{q}_k^{(\sqrt{2})} \} \right) \right| \Rightarrow \\ |\hat{Q}| &= n(n^2 - 4) + 3(n - 1) + (n - 2) \\ &= n^3 - 5.\end{aligned}$$

Definition 4.3.2. Eine Menge R , wobei $R \subset \mathfrak{R}$, heit **vollstndige Stomenge**, wenn $\text{rank}(g(R)) = n^3 - 5$. Und R ist eine **minimal vollstndige Stomenge** wenn:

$$\text{rank}(g(R)) = |R| = n^3 - 5.$$

Im folgenden Lemma mchten wir einige Beispiele fr vollstndige Stomengen angeben.

Lemma 4.3.3.

- (a) Die Menge \hat{Q} , die in 4.87 gegeben ist, ist eine minimal vollstndige Stomenge.
- (b) $\hat{\mathfrak{Q}}$ ist die Menge aller Quadrate, die jeweils senkrecht zu einer Achse sind. (Ein Rechteck bzw. Quadrat ist senkrecht zu x -Achse genau dann, wenn dessen Normalenvektor parallel zu $(1, 0, 0)^T$ ist.)
- (c) Die Menge $\hat{\mathfrak{R}}$ aller Rechtecke, die senkrecht zu einer Achse sind, ist vollstndig.

Beweis:

(a): Aus der obigen Zusammenfassung folgt, dass $\text{rank}(g(\hat{Q})) = |\hat{Q}| = n^3 - 5$.

(b): Man kann leicht sehen, dass $\hat{Q} \subseteq \hat{\mathfrak{Q}}$. Auerdem gilt:

$$|\hat{\mathfrak{Q}}| = 3n \times \frac{n^2(n^2 - 1)}{12} = \frac{n^3(n^2 - 1)}{4}.$$

(c): Man kann leicht sehen, dass $\hat{Q} \subseteq \hat{\mathfrak{R}}$. \square

Zurck zur homogenen Boltzmann-Gleichung

Lemma 4.3.4. *Sei $R \subset \mathfrak{R}$ eine vollständige Stoßmenge. Dann folgt, dass die positive Gleichgewichtslösung der homogenen Boltzmann-Gleichung*

$$\partial_t f(v, t) = J_R[f, f](v, t)$$

eine Maxwellfunktion ist.

Beweis: Der Beweis ist ähnlich wie beim 2D-Fall.

4.3.1 Ein Algorithmus, um alle Quadrate und Rechtecke zu finden

Bevor wir einen Algorithmus beschreiben, der alle Rechtecke bzw. aller Quadrate findet, möchten wir ein Algorithmus vorstellen, um die Durchschnittsmenge $\hat{E}_{\vec{s}}$ zwischen einer

Ebene $E_{\vec{s}}$ und \mathbb{Z}^3 zu berechnen. Es sei $O \in E_{\vec{s}}$ **Nullpunkt**, und $\vec{s} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{\vec{0}\}$

der Normalvektor der Ebene $E_{\vec{s}}$. Danach möchten wir auch zeigen, wie die Punkte der Ebene $\hat{E}_{\vec{s}}$ verteilt sind.

Definition 4.3.5. *Eine linear unabhängige Menge $B \subset \mathbb{Z}^3$ heißt **ganzzahlige Basis** von $\hat{E}_{\vec{s}}$, wenn jeder Vektor aus $\hat{E}_{\vec{s}}$ sich als Linearkombination aus B mit ganzzahligen Koeffizienten darstellen lässt.*

Einige Eigenschaften von $\hat{E}_{\vec{s}}$ werden im folgenden Lemma geschildert und eine hinreichende Bedingung für die **ganzzahlige Basis** von $\hat{E}_{\vec{s}}$ angeben.

Lemma 4.3.6. *Seien $u, v \in \hat{E}_{\vec{s}} \setminus \{O\}$, wobei u, O, v keine Gerade ist, und seien $\vec{u} = \overrightarrow{Ou}$, $\vec{v} = \overrightarrow{Ov}$. Dann ist $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ eine ganzzahlige Basis für $\hat{E}_{\vec{s}}$ genau dann, wenn gilt*

$$\{p := \alpha\vec{u} + \beta\vec{v} : \alpha, \beta \in [-1, 1], 0 < |\alpha| + |\beta| < 2\} \cap \hat{E}_{\vec{s}} = \emptyset. \quad (4.88)$$

Beweis:

Für den Beweis macht man folgende Schritte:

1. Da $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ eine linear unabhängige Menge aus $E_{\vec{s}}$ ist, folgt, dass $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ eine Basis von $E_{\vec{s}}$ ist. D. h.

$$\forall p \in E_{\vec{s}} \Rightarrow \exists x, y \in \mathbb{R} : p = x \cdot \vec{u} + y \cdot \vec{v}. \quad (4.89)$$

2. Offensichtlich gelten folgende Aussagen:

$$p_1, p_2 \in \hat{E}_{\vec{s}} \Rightarrow p_1 \mp p_2 \in \hat{E}_{\vec{s}}, \quad (4.90)$$

$$p \in \hat{E}_{\vec{s}}, q \in (\mathbb{R}^3 - \hat{E}_{\vec{s}}) \Rightarrow p \mp q \notin \hat{E}_{\vec{s}}. \quad (4.91)$$

Aus der Bedingung 4.88 und 4.90,4.91 folgt, dass:

$$\left\{ p := (m + \alpha)\vec{u} + (n + \beta)\vec{v} : \begin{array}{l} \alpha, \beta \in [-1, 1], \\ 0 < |\alpha| + |\beta| < 2 \end{array}, m, n \in \mathbb{Z} \right\} \cap \hat{E}_{\vec{s}} = \emptyset. \quad (4.92)$$

3. Nach 4.89 gilt:

$$p \in \hat{E}_{\vec{s}} \Rightarrow \exists x, y \in \mathbb{R} : p = x \cdot \vec{u} + y \cdot \vec{v}. \quad (4.93)$$

Aber nach 4.92 folgt, dass $x, y \in \mathbb{Z}$. \square

Jetzt möchten wir nach dem Lemma 4.3.6 eine ganzzahlige Basis von $\hat{E}_{\vec{s}}$ finden. Das folgende Lemma liefert uns einen Algorithmus, mit dem wir die Elemente von $\hat{E}_{\vec{s}}$ ($E_{\vec{s}} \neq (xy_Ebene)$) schichtweise erzeugen können. Dafür brauchen wir zwei Vektoren \vec{u}, \vec{v} , wobei $\hat{E}_{\vec{s}} \cap (xy_Ebene) = \{k \cdot \vec{u}\}$.

Lemma 4.3.7. Sei $\vec{s} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^3$, mit $|a| + |b| \neq 0$, und seien

$$m_1 := ggT(|a|, |b|), m_2 := ggT(|m_1|, |c|).$$

Dann folgt:

$$\exists x_0, y_0 \in \mathbb{Z} : ax_0 + by_0 + m_1 = 0$$

und die Menge $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ ist eine ganzzahlige Basis von $\hat{E}_{\vec{s}}$, wobei

$$\vec{u} = \left(-\frac{b}{m_1}, \frac{a}{m_1}, 0 \right)^T, \quad \vec{v} = \left(\frac{c \cdot x_0}{m_2}, \frac{c \cdot y_0}{m_2}, \frac{m_1}{m_2} \right)^T.$$

Beweis:

Zuerst folgt aus dem Lemma 4.1.7 und seinem Beweis, dass:

$$\left(-\frac{b}{m_1}, \frac{a}{m_1}, 0 \right) \in \hat{E}_{\vec{s}}, \quad \{\alpha \vec{u}, \quad 0 < \alpha < 1\} \cap \mathbb{Z}^3 = \emptyset.$$

Nach dem Lemma von Bézout (siehe [35], [49]) lässt sich der größte gemeinsame Teiler $ggT(.,.)$ zweier ganzer Zahlen a und b als Linearkombination von a und b mit ganzzahligen Koeffizienten darstellen. Daraus folgt dass :

$$\exists x_0, y_0 \in \mathbb{Z} ; \quad ax_0 + by_0 = -m_1 \Rightarrow \quad ax_0 + by_0 + m_1 = 0 \Rightarrow$$

$$a \cdot cx_0 + b \cdot cy_0 + cm_1 = 0.$$

Weiter folgt:

$$(cx_0, cy_0, m_1) \in \hat{E}_{\vec{s}} \Rightarrow \frac{1}{m_2} (cx_0, cy_0, m_1) \in \hat{E}_{\vec{s}}.$$

Wir wählen

$$\vec{v} = \left(\frac{cx_0}{m_2}, \frac{cy_0}{m_2}, \frac{m_1}{m_2} \right)^T.$$

Außerdem ist:

$$ax + by + cz = 0 \Rightarrow cz \in \{k \cdot m_1; \quad k \in \mathbb{Z}\} \Rightarrow z \in \left\{ k \cdot \frac{m_1}{m_2}; \quad k \in \mathbb{Z} \right\},$$

welches ergibt, dass:

$$\{\alpha \vec{v}, \quad 0 < \alpha < 1\} \cap \mathbb{Z}^3 = \emptyset.$$

Damit hat man schließlich

$$\{p := \alpha \vec{u} + \beta \vec{v} : \alpha, \beta \in [-1, 1], 0 < |\alpha| + |\beta| < 2\} \cap \hat{E}_{\vec{s}} = \emptyset,$$

was bedeutet, dass $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ eine ganzzahlige Basis von \hat{E}_s ist. \square

Hinweis 4.3.8. Im Lemma 4.3.7 brauchten wir die Formel:

$$\begin{aligned} a, b \in \mathbb{N}, \quad m = ggT(a, b) &\Rightarrow \exists x_0, y_0 \in \mathbb{Z} : \\ m &= x_0 a + y_0 b \end{aligned}$$

Die Frage lautet nun, wie kann man x_0, y_0 bestimmen? Im Folgenden möchten wir dazu eine rekursive Methode beschreiben. Sei $a < b$

$$\Rightarrow \exists n, r \in \mathbb{N} : \quad b = na + r.$$

Zwei Fälle werden hier betrachtet:

$r = 0$: $\Rightarrow m = a$, das bedeutet

$$x_0 = 1, \quad y_0 = 0.$$

$r > 0$:

$$\begin{aligned} \Rightarrow m &= x_0 a + y_0 b = x_0 a + y_0 (na + r) \\ &= \underbrace{(x_0 + ny_0)}_{x_1} a + \underbrace{y_0}_{y_1} r. \end{aligned}$$

Jetzt kann man x_0, y_0 durch x_1, y_1 berechnen:

$$x_0 = x_1 - ny_1$$

$$y_0 = y_1.$$

Bis jetzt können wir durch wenige Schritte eine ganzzahlige Basis von $\hat{E}_{\vec{s}}$ finden. Das ermöglicht uns, alle Elemente von $\hat{E}_{\vec{s}}$ direkt zu finden. Um die Anzahl der Punkte von $\hat{E}_{\vec{s}}$ in einem bestimmten Raum zu schätzen, möchten wir den **Divergenzfaktor** definieren.

Definition 4.3.9. Sei $\{\vec{u}, \vec{v}\}$ eine ganzzahlige Basis von $\hat{E}_{\vec{s}}$. Die Fläche des Parallelogramms $O, u, (u+v), v$ nennen wir **Divergenzfaktor** von $\hat{E}_{\vec{s}}$.

Lemma 4.3.10. Der Divergenzfaktor von $\hat{E}_{\vec{s}}$ ist konstant und hängt nicht von der ganzzahligen Basis ab. Sein Wert ist

$$\sqrt{\frac{(a^2 + b^2) m_1^2 + c^2 (ax_0 + by_0)^2}{m_1^2 m_2^2}}$$

wobei $a, b, c, m_1, m_2, x_0, y_0$ wie im Lemma 4.3.7 beschrieben sind.

Beweis: Den Beweis überlassen wir dem Leser.

Aus dem Lemma 4.3.10 können wir leicht ersehen, dass der Divergenzfaktor von der Funktion $ggT()$ abhängt, das heißt, dass der Divergenzfaktor von Primfaktoren des ggT abhängt. Das Bild 4.24 zeigt den Divergenzfaktor von verschiedenen Ebenen $\hat{E}_{\vec{s}}$. Auf der linken Seite $\vec{s} = (a, b, 12)^T$ sehen wir die unregulierte Verteilung, insbesondere wenn a, b einen gemeinsamen Teiler aus $\{2, 3\}$ haben. Auf der rechten Seite sieht man die unregulierte Verteilung, wenn a, b einen gemeinsamen Teiler aus $\{3, 5\}$ haben.

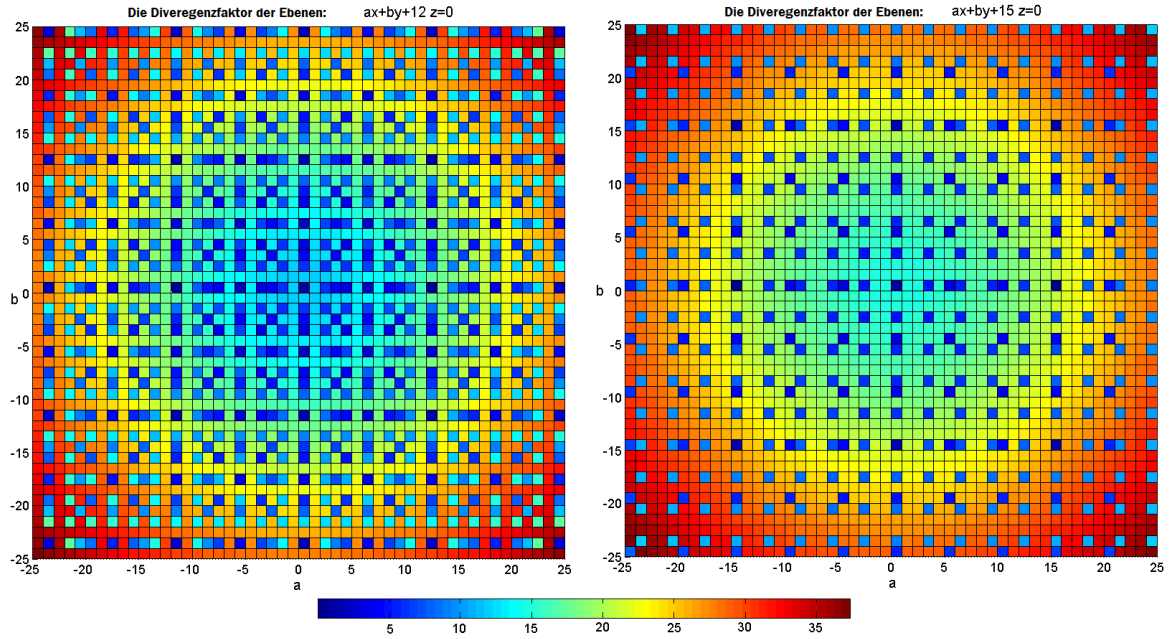


Abbildung 4.24: Der Divergenzfaktor zu den Ebenen : $ax+by+12z = 0$, $ax+by+15z = 0$.

4.3.1.1 Die Rechtecke

Durch folgende Schritte möchten wir einen Algorithmus beschreiben, um alle Rechtecke auf

$$G_n = \{0, \dots, n\}^3$$

zu bestimmen. Hier führen wir folgende Schritte durch:

1. $\forall \vec{s} \in \{-n, \dots, n\}^3$ finden wir die Menge $C_{\vec{s}}$:

$$C_{\vec{s}} = \hat{E}_{\vec{s}} \cap \{-n, \dots, n\}^3.$$

2. Für alle Vektoren $\vec{s}^\perp = \overrightarrow{OP} : p \in C_{\vec{s}}$ berechnet man das Stammrechteck $r_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}^0$:

$$r_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}^0 = \begin{bmatrix} O & s & s^\perp & (s + s^\perp) \end{bmatrix},$$

wobei $O = (0, 0, 0)$.

3. $R_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}$ ist die Menge aller Rechtecke, deren Seiten parallel zu \vec{s}, \vec{s}^\perp sind:

$$R_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)} = \left\{ r : r = r_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}^0 + v, \quad v \in \{0, \dots, n\}^3 \text{ und alle Ecken von } r \text{ sind aus } G_n \right\}.$$

4. Die Menge aller **Rechtecke** ist:

$$\mathfrak{R} = \bigcup_{\vec{s} \in \{-n, \dots, n\}^3} \left\{ \bigcup_{\vec{s}^\perp \in C_s} R_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)} \right\}.$$

4.3.1.2 Die Quadrate

Ähnlich wie bei den Rechtecken möchten wir durch folgende Schritte einen Algorithmus beschreiben, um alle Quadrate auf

$$G_n = \{0, \dots, n\}^3$$

zu berechnen. Hier führen wir folgende Schritte durch:

1. $\forall \vec{s} \in \{-n, \dots, n\}^3$ finden wir die Menge $C_{\vec{s}}$:

$$C_{\vec{s}} = \hat{E}_{\vec{s}} \cap \{-n, \dots, n\}^3.$$

2. Für alle Vektoren $\vec{s}^\perp = \overrightarrow{OP} : p \in C_{\vec{s}}, \|\vec{s}^\perp\| = \|\vec{s}\|$ berechnet man das Stammquadrat $q_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}^0$:

$$q_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}^0 = \begin{bmatrix} O & s & s^\perp & (s + s^\perp) \end{bmatrix},$$

wobei $O = (0, 0, 0)$.

3. $Q_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}$ ist die Menge aller Quadrate, deren Seiten parallel zu \vec{s}, \vec{s}^\perp sind:

$$Q_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)} = \left\{ r : r = r_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)}^0 + v, \quad v \in \{0, \dots, n\}^3 \text{ und alle Ecken von } r \text{ sind aus } G_n \right\}.$$

4. Die Menge aller **Quadrate** ist:

$$\mathfrak{Q} = \bigcup_{\vec{s} \in \{-n, \dots, n\}^3} \left\{ \bigcup_{\vec{s}^\perp \in C_s} Q_{(\vec{s}, \vec{s}^\perp)} \right\}.$$

Hinweis 4.3.11. Die Anzahl aller Elemente der Menge \mathfrak{Q} kann man nicht als Polynom formulieren, da sie von den Primzahlen und der Funktion $\gcd(.,.)$ abhängt. Wir möchten nun eine Beschränkung dafür finden.

Für einen Punkt $s \in \{\mathbb{Z}^+\}^3$ definieren wir die Funktion

$$3d_Quad_anzahl(s),$$

die Anzahl aller Quadrate, deren Knoten auf \mathbb{Z}^3 liegen und \vec{Os} als Seite haben, wobei O der Ursprungspunkt ist. Danach definieren wir die Funktion folgendermaßen:

$$SchichtAnzahl(n) = \sum_{s \in \mathbb{Z}^3, \|z\|_1 = n} 3d_Quad_Anzahl(s).$$

In der Abbildung 4.25 kann man den Verlauf der Funktion $SchichtAnzahl(n)$ sehen. Wir können daraus ableiten, dass der Graph für die Primzahlen (größer als 3) immer ein lokales Minimum hat. Auf der anderen Seite hat die Funktion $SchichtAnzahl(n)$ ein lokales Maximum für eine Zahl n , wenn die Anzahl ihrer Teiler größer ist als die Anzahl der Teiler von $(n+1)$, $(n-1)$.

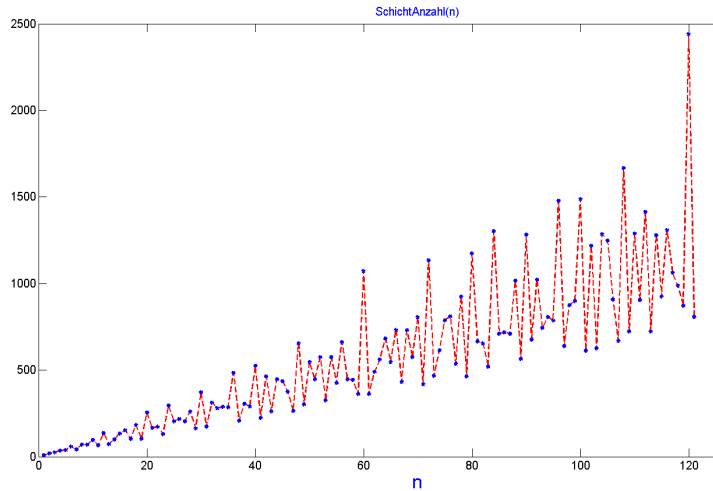


Abbildung 4.25: Quadratanzahl schichtweise

Eine andere Betrachtung können wir in der Abbildung 4.26 sehen. Wir erkennen, dass für $n \geq 3$ gilt:

$$\forall n \in \{3, 4, \dots\} \Rightarrow \\ SchichtAnzahl(n) \leq 4 \cdot n \cdot TeilerAnzahl(n).$$

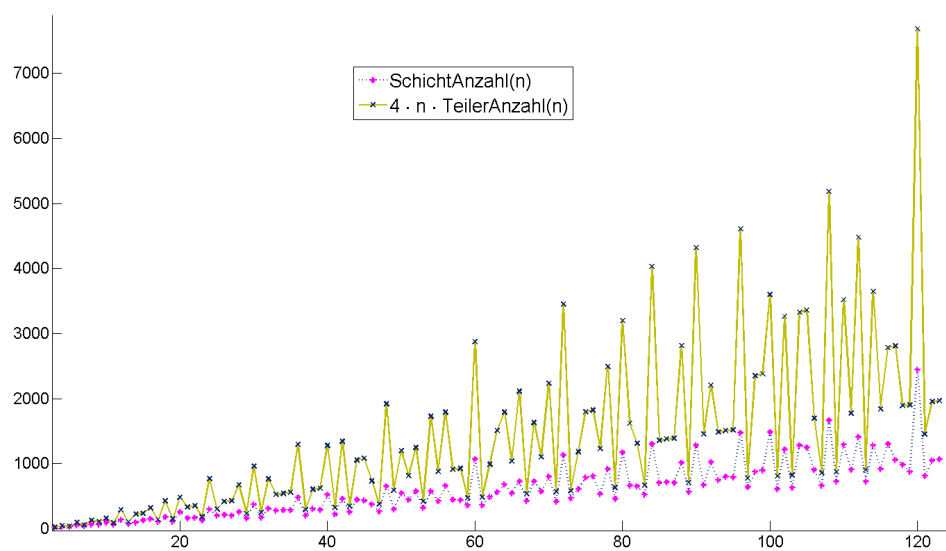


Abbildung 4.26: Begrenzung der Quadratanzahl

5 Die Boltzmann-Gleichung in den komplexen Randbedingungen

Im letzten Kapitel haben wir uns mit der homogenen Boltzmann-Gleichung und dem Stoßoperator beschäftigt. Hier möchten wir die Transportgleichung betrachten.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Beschreibung einer Strategie zur Lösung der Boltzmann-Gleichung im beliebigen Ortsraum $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$. Dabei sollen drei Punkte berücksichtigt werden:

1. Bau eines kompletten Programmes
2. Simulation unter Angabe beliebiger Anfangswerte und Randbedingungen
3. Entnahme der Ergebnisse als Bilder oder Videos

Zur Erinnerung: Die Boltzmann-Gleichung wird durch das Anfangswertproblem

$$(\partial_t + v \nabla_x) f(t, x, v) = J[f, f], \quad (5.1)$$

die Anfangswerte

$$f(0, x, v) = f_0(x, v) \quad (5.2)$$

und die Randbedingung

$$f(t, \delta\Omega, v) = R_f(t, \delta\Omega, v) \quad (5.3)$$

beschrieben, wobei die Dichtefunktion eine Abbildung $f : \mathbb{R}^+ \times \Omega \times G \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit dem Ortsraum $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ und dem Geschwindigkeitsraum $G \subseteq \mathbb{R}^d$ mit $d \in \{2, 3\}$ ist. Der Kollisionsoperator ist

$$J[f, f](v) = \int_G \int_{S^{d-1}} k(v - w, \eta) [f(v')f(w') - f(v)f(w)] d^{d-1}\eta d^d w. \quad (5.4)$$

5.1 Numerisches Verfahren

Eine klassische Operator-Splitting-Methode wurde für die Berechnung der Lösungen der Boltzmann-Gleichung verwendet, die durch die Gleichungen 5.1 , 5.2 und 5.3 beschrieben wird. Diese ergibt sich aus der Aufspaltung der Gleichung in einen Transport- und einen Kollisions-Schritt. Der erste Schritt löst die Transport-Gleichung während eines Zeitschritts Δt

$$\begin{aligned} (\partial_t + v \nabla_x) h(0, x, v) &= 0 \\ h(0, x, v) &= f(0, x, v) \end{aligned} \quad (5.5)$$

wobei f eine gegebene Lösung aus dem vorherigen Schritt ist. Der Kollision-Schritt löst die homogen kinetische Gleichung

$$\begin{aligned} \partial_t f^*(0, x, v) &= J[f(t, \cdot, \cdot), f(t, \cdot, \cdot)](v) \\ f^*(0, x, v) &= h(\Delta t, x, v). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Die Lösung dieser Gleichung ergibt die Lösung der Boltzmann-Gleichung nach einem Zeitschritt Δt :

$$f(t + \Delta t, \cdot, \cdot) = f^*(\Delta t, \cdot, \cdot).$$

In diesem Kapitel betrachten wir nur die Lösung des Transportsystems 5.5. Diese hängt nicht vom Boltzmannkollisionsoperator ab. Das zweite System 5.6 hängt nicht vom Ortsraum ab, und ist eine gewöhnliche Differenzialgleichung erster Ordnung. Die kann durch Runge-Kuta-Verfahren, Euler-Verfahren, ...etc. gelöst werden. Wenn wir das Euler-Verfahren verwenden, ergibt sich die Lösung:

$$f^*(\Delta t) = f^*(0) + \Delta t \cdot J[f(0), f(0)]. \quad (5.7)$$

Zuerst muss man die $J[\cdot, \cdot]$ berechnen. Es gibt Methoden, um nur den Kollisionsoperator zu betrachten, z.B. Monte-Carlo-Methode und die Diskreten Geschwindigkeitsmodelle. Im vorgehenden Kapitel dieser Arbeit haben wir uns viel mit dem diskretisierten Geschwindigkeitsmodell beschäftigt.

5.2 Installation eines Modells in einer Matrix

Hier möchten wir eine sehr praktische Methode beschreiben, welche zeigt, wie die Boltzmann-Gleichung auf einem 2D-Ortsraum modelliert wird. Unser Ziel ist hier, eine Toolbox zu bauen (zu programmieren), die ein Bild als Skizze des Modells mit bestimmten Eigenschaften nimmt und ermöglicht, die Randbedingungen und die An-

fangswerte zu definieren.

Eigenschaften und Voraussetzungen des Bildes: Das Skizze-Bild darf nur schwarz-weiß sein. Deswegen nehmen wir in unserer Arbeit die Monochrom-Bitmap-Bilder. Diese Art von Bildern sind einfach zu erstellen. Es gibt dafür viel Software (z.B. Matlab, Maple, Paint, Autocad ... etc.), die Monochrom-Bitmap-Bilder erzeugen können. Die schwarzen Punkte betrachten wir als Randpunkte (Begrenzungspunkte) und die weißen können Gasgebiete oder Wände darstellen. Außerdem dürfen die schwarzen Punkte nur auf Ketten verteilt sein (Beispiel siehe die Abb. 5.1).

Das Monochrom-Bitmap-Bild wird als $2D - Matrix$ gespeichert, deren Elemente aus der Menge $\{0, 1\}$ sind. D. h. jedes Monochrom-Bitmap-Bild ist eine Matrix mit den Werten 0 und 1, und jede Matrix mit Werten aus $\{0, 1\}$ erzeugt auch ein Monochrom-Bitmap-Bild.

Definition 5.2.1. Die Board-Matrix $Board_0$: Für ein Monochrom-Bitmap-Bild definieren wir die Matrix $Board_0$, so dass für die 0 die Weiß- und für die 1 die Schwarzpixel gelten.

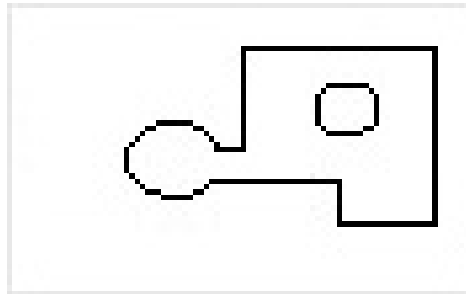


Abbildung 5.1: Monochrom-Bitmap-Bild

5.2.1 Hauptmatrix

Manchmal befinden sich die Ränder nur in einem Rechteckteil des Bildes und die anderen Punkte spielen keine Rolle in unserer Simulation. Das Rechteckteil der Matrix $Board_0$, das die wesentlichen Daten enthält, nennen wir $Board$ (siehe 5.2), und möchten es betrachten. Deswegen versuchen wir jetzt die Matrix $Board$ mit dem folgenden Algorithmus zu bestimmen.

$Board_0$ sei eine $N_0 \times M_0$ Matrix und wir definieren die Mengen X_r, Y_r .

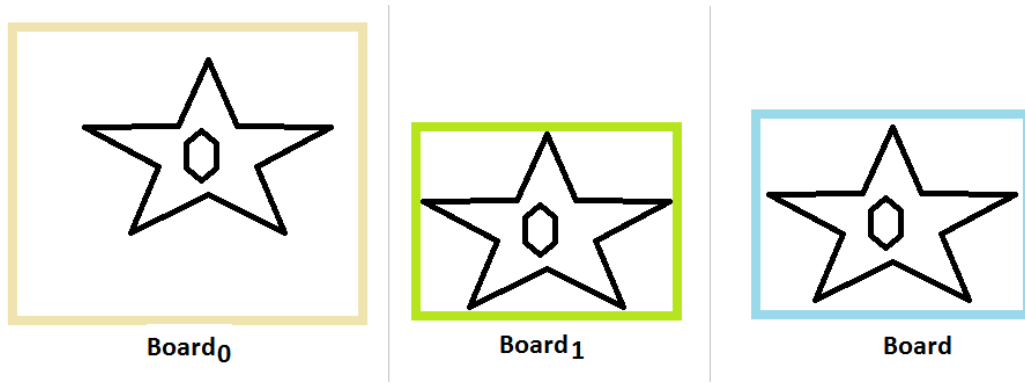


Abbildung 5.2: Bildbearbeitung und Matrixreduzierung

Die Indexmenge X_r

$$X_r = \{x \in \{1, \dots, N_0\} ; \exists y \in \{1, \dots, M_0\} \text{ mit } Board_0[x, y] = 1\}. \quad (5.8)$$

Die Indexmenge Y_r

$$Y_r = \{y \in \{1, \dots, M_0\} ; \exists x \in \{1, \dots, N_0\} \text{ mit } Board_0[x, y] = 1\}. \quad (5.9)$$

Es sei :

$$\begin{aligned} x_0 &= \min X_r, & x_1 &= \max X_r \\ y_0 &= \min Y_r, & y_1 &= \max Y_r. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Die erste Hauptmatrix $Board_1$ lautet:

$$Board_1 = Board_0[x_0 \dots x_1, y_0 \dots y_1]. \quad (5.11)$$

$Board_1$ ist demnach eine $(x_1 - x_0) \times (y_1 - y_0)$ Matrix. Die Matrix $Board$, die wir behandeln werden, ist eine Erweiterungsmatrix von $Board_1$, und ist durch

$$Board = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & Board_1 & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

gegeben. $Board$ ist eine Matrix mit der Größe $N \times M$, wobei $N = 2 + (x_1 - x_0)$, $M = 2 + (y_1 - y_0)$.

Definition 5.2.2. Wir definieren die Menge Ω

$$\Omega = \{1 \cdots N\} \times \{1 \cdots M\}. \quad (5.13)$$

Die Randmenge \mathfrak{R} wird folgendermaßen definiert:

$$\mathfrak{R} = \{p \in \Omega ; \text{Board}[p_1, p_2] = 1\}. \quad (5.14)$$

Außerdem definieren wir die **Nachbarpunkte**: Seien $P_1, P_2 \in \Omega$ verschiedene Punkte, so sagen wir, dass P_1, P_2 nur Nachbarn sind, wenn

$$\begin{aligned} \exists a, b \in \{-1, 0, 1\} : \quad P_2 = P_1 + a\varepsilon_1 + b\varepsilon_2 \\ \text{mit} \quad \varepsilon_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \varepsilon_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Wenn $a^2 + b^2 = 1$ ist, nennt man P_1, P_2 **Achsen-Nachbarpunkte**.

Wenn $a^2 + b^2 = 2$ ist, nennt man P_1, P_2 **Diagonal-Nachbarpunkte**.

Definition 5.2.3. Sei $p \in \Omega$, dann definieren wir die zwei Nachbarmengen von p :

$$S(p) = \{q \in \mathbb{Z}^2 \mid \exists a, b \in \{-1, 0, 1\} : \quad q = p + a\varepsilon_1 + b\varepsilon_2\} \cap \Omega, \quad (5.15)$$

und die Achsen-Nachbarmenge von p :

$$\hat{S}(p) = \{q \in \mathbb{Z}^2 \mid \exists a, b \in \{-1, 0, 1\} : \quad q = p + a\varepsilon_1 + b\varepsilon_2 \quad \& \quad a \cdot b = 0\} \cap \Omega. \quad (5.16)$$

Die Nachbarmengen einer Teilmenge $A \subseteq \Omega$ sind

$$S(A) = \bigcup_{p \in A} S(p) \quad ; \quad \hat{S}(A) = \bigcup_{p \in A} \hat{S}(p). \quad (5.17)$$

Im Folgenden möchten wir die Algorithmen beschreiben, die bestimmte Randpunkte und deren Randbedingungen und Anfangswerte für die Gaszonen festlegen. Die unten stehenden Voraussetzungen sind sehr wichtig für zu behandelnde Bilder bzw. die Hauptmatrix.

Voraussetzungen (1):

1. $\forall p \in \mathfrak{R} \text{ gilt} : |S(p) \cap \mathfrak{R}| = 3.$
2. $\forall p, q \in \mathfrak{R}, p \neq q \text{ gilt} : S(p) \cap \mathfrak{R} \neq S(q) \cap \mathfrak{R}.$

Aufgrund dieser Voraussetzung sehen die Nachbarpunkte eines Randpunkts p wie folgt aus:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \circ & * & \circ \\ \hline \circ & p & \circ \\ \hline \circ & * & \circ \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline \circ & \circ & * \\ \hline \circ & p & \circ \\ \hline \circ & * & \circ \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline \circ & \circ & * \\ \hline \circ & p & \circ \\ \hline \circ & \circ & * \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline \circ & \circ & * \\ \hline \circ & p & \circ \\ \hline * & \circ & \circ \\ \hline \end{array}, \quad (5.18)$$

wobei die *-Punkte Randpunkte sind, und die o-Punkte nicht Randpunkte sein dürfen, auch bei Drehung von $\frac{k \cdot \pi}{2}$, $k = 0, 1, 2, 3$. Die Voraussetzungen (1) verbietet den

folgenden Fall $\begin{array}{|c|c|} \hline p_0 & p_1 \\ \hline p_2 & \circ \\ \hline \end{array}$ und seine Drehungen, weil $\{p_0, p_1, p_2\} \subseteq S(p_i) \cap \mathfrak{R}$, $i = 0, 1, 2$.

Im Folgenden betrachten wir die Bilder, die die Voraussetzungen (1) erfüllen.

Definition 5.2.4. Für einen Punkt $p \in \mathfrak{R}$ sei: $S(p) \cap \mathfrak{R} = \{c, p, q\}$. Wir definieren die Funktionen $\mathfrak{S}_c, \mathfrak{S}_q$:

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_c : \{p\} &\rightarrow \{q\}, \\ \mathfrak{S}_q : \{p\} &\rightarrow \{c\}. \\ \mathfrak{S}_c(p) &= q, \mathfrak{S}_q(p) = c. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Für die Randnachbarpunkte p, q ist $\mathfrak{S}_q(p)$ der nächste Randpunkt nach p in Richtung \vec{qp} . Ebenso ist $\mathfrak{S}_q^n(p)$ der n -te nächste Randpunkt nach p in Richtung \vec{qp} .

$$\mathfrak{S}_q^n(p) = \begin{cases} p & \text{falls } n = 0, \\ \mathfrak{S}_q(p) & \text{falls } n = 1, \\ \mathfrak{S}_p^{n-1}(\mathfrak{S}_q(p)) & \text{falls } n > 1, \end{cases} \quad (5.20)$$

wobei $n \in \mathbb{N}$.

Lemma 5.2.5. Zu $p \in \mathfrak{R}$ und $q \in S(p) \cap \mathfrak{R} - \{p\}$ definieren wir die Folge:

$$c_k = \mathfrak{S}_p^k(q) : k \in \mathbb{N}.$$

Dann gilt:

$$1. \forall k \in \mathbb{N} \Rightarrow \mathfrak{S}_{c_k}^k(c_{k-1}) = p, \mathfrak{S}_{c_k}^{k-1}(c_{k-1}) = q.$$

$$2. \exists n \in \mathbb{N}; \mathfrak{S}_p^n(q) = q.$$

Beweis

1. Fall:

$$S(q) \cap \mathfrak{R} = \left\{ p, q, \underbrace{\mathfrak{S}_p(q)}_c \right\},$$

Daraus folgt, dass:

$$\mathfrak{S}_p(q) = c \Rightarrow \left[\mathfrak{S}_c(q) = p \Rightarrow \mathfrak{S}_{\mathfrak{S}_p^1(q)}(\mathfrak{S}_p^0(q)) = p \right].$$

Damit ist die Aussage richtig für $n = 1$. Wir nehmen an, dass diese für ein $k \in \mathbb{N}$, $k > 1$ gilt, d.h.

$$\forall k \in \mathbb{N} \Rightarrow \mathfrak{S}_{c_k}^k(c_{k-1}) = p, \mathfrak{S}_{c_k}^{k-1}(c_{k-1}) = q$$

. Jetzt möchten wir die Gültigkeit für $k + 1$ untersuchen:

$$\begin{aligned} c_{k+1} = \mathfrak{S}_{c_{k-1}}(c_k) &\Rightarrow c_{k-1} = \mathfrak{S}_{c_{k+1}}(c_k) \Rightarrow \\ p = \mathfrak{S}_{c_k}^k(\mathfrak{S}_{c_{k+1}}(c_k)) &\underbrace{=} \mathfrak{S}_{c_{k+1}}^{k+1}(c_k). \end{aligned}$$

Siehe die Formel 5.20.

2. Zuerst schreiben wir

$$k \in \mathbb{N}, \widehat{S}(c_k) := S(p) \cap \mathfrak{R} = \{c_{k-1}, c_k, c_{k+1}\},$$

wobei $p = c_{-1}$, $q = c_0$.

Falls eine positive ganze Zahl m existiert ist, $2 < m < (|\mathfrak{R}| - 2)$, wobei die Punkte $p = c_{-1}$, $q = c_0$, c_1, \dots, c_m paarweise voneinander verschieden sind, und $c_{m+1} \in \{p, q, c_1, \dots, c_m\} \subseteq \mathfrak{R}$. Dann muss $c_{m+1} = p$ sein, sonst ist $|S(c_{m+1}) \cap \mathfrak{R}| > 3$, weil

$$c_{m+1} \notin \{c_{m-1}, c_m\} \quad \text{weil} \quad S(c_m) \cap \mathfrak{R} = \{c_{m-1}, c_m, c_{m+1}\}.$$

$$\begin{aligned} \text{Falls } \exists r \in \{0, 1, \dots, (m-2)\} : c_{m+1} = c_r &\Rightarrow \\ S(c_{m+1}) \cap \mathfrak{R} = \{c_{r-1}, c_r, c_{r+1}, c_m\}. \end{aligned} \tag{5.21}$$

Andererseits, falls $m = (|\mathfrak{R}| - 2)$, dann folgt, dass $\{p, q, c_1, \dots, c_m\} = \mathfrak{R}$. Das ergibt, dass $c_{m+1} \in \{p, q, c_1, \dots, c_m\}$ und das bedeutet, dass $c_{m+1} = p$.

Definition 5.2.6. Wir nennen die geordnete Menge $\{p, q, \mathfrak{S}_p(q), \dots, \mathfrak{S}_p^{n-1}(q)\}$ Rand-Kette, wobei $n > 2, \mathfrak{S}_p^{n-1}(q) = p$. Die Menge aller Rand-Ketten heißt \mathbb{K} .

Einige Eigenschaften der Rand-Ketten möchten wir im folgenden Lemma darstellen.

Lemma 5.2.7. 1. $\forall K \in \mathbb{K}$ und $\forall p \in K$ gilt : $S(p) \cap \mathfrak{R} \subset K$.

2. $\forall K_1, K_2 \in \mathbb{K}$ gilt $K_1 \neq K_2 \Leftrightarrow K_1 \cap K_2 = \Phi$.

Beweis: Den Beweis überlassen wir dem Leser.

Ergebnisse: Wenn ein Bild (bzw. seine Hauptmatrix) die *Voraussetzungen (1)* erfüllt, sind seine Randpunkte als Ketten verteilt. Ist außerdem ein Punkt einer Kette bekannt, können wir dadurch alle Punkte der Kette finden. Eine wichtige Anwendung der Funktion $\mathfrak{S}(\cdot)$ ist, dass wir durch sie die Randbedingungen für eine beliebige Randpunkteserie einer Rand-Kette nur mit Hilfe des ersten und letzten Punkts der Serie und der Richtung eingeben können.

Im Folgenden möchten wir uns mit der Eingabemethode für Anfangswerte beschäftigen.

Definition 5.2.8. Für die Punkte $p, q \in \Omega - \mathfrak{R}$ ist die Punkteserie

$$p = c_0, c_1, \dots, c_n = q$$

ein **Weg von p zu q** falls,

- $c_0, c_1, \dots, c_n \in \Omega - \mathfrak{R}$,
- $c_i \in \hat{S}(c_{i-1}), \forall i \in \{1, \dots, n\}$. (D.h. c_i, c_{i-1} sind Achsen-Nachbarpunkte.)

Definition 5.2.9. Seien $p, q \in \Omega - \mathfrak{R}$. Falls es einen Weg zwischen p und q gibt, sagen wir, dass p, q miteinander durch **die Beziehung** \Leftrightarrow verbunden sind.

Bemerkung: Die Beziehung \Leftrightarrow ist eine Äquivalenzrelation auf $\Omega - \mathfrak{R}$ und diese zerlegt $\Omega - \mathfrak{R}$ in Äquivalenzklassen.

Lemma 5.2.10. A ist eine Äquivalenzklasse der Beziehung \Leftrightarrow . Dann gilt:

1. $\hat{S}(A) \subseteq A \cup \mathfrak{R}$. D.h. $\hat{S}(A)$ hat keine gemeinsamen Elemente mit den anderen Äquivalenzklassen von \Leftrightarrow .

2. $\forall K \in \mathbb{K}$ gilt : $\hat{S}(A) \cap K \neq \Phi \Rightarrow K \subseteq \hat{S}(A)$.

Beweis

1.

$$\begin{aligned} &\forall p \in A, \forall c \in \hat{S}(p), \\ &\text{falls } c \notin \mathfrak{R} \Rightarrow p \leftrightarrow c, \end{aligned}$$

d.h. c ist aus der Äquivalenzklasse von p , die A ist.

2. Sei $p \in \hat{s}(A) \cap \mathfrak{R}$. Wir werden hier zuerst beweisen, dass $\{q_1, p, q_2\} := S(p) \cap \mathfrak{R} \subset \hat{S}(A)$. Zuerst $\exists a \in A$ wobei $p \in \hat{S}(a)$, d.h. $a \in \hat{S}(p)$. Die Punkteverteilung der Punkte um den Punkt p ist in 5.18 dargestellt. Wir unterteilen die Nichttrandpunkte in zwei Mengen wie in 5.22.

$$\begin{array}{ccccccc} \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & q_1 & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & \clubsuit & q_1 \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & \clubsuit & q_1 \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & \clubsuit & q_1 \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & p & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & p & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & p & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & p & \diamond \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & q_2 & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & q_2 & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline \clubsuit & q_2 & \diamond \\ \hline \end{array} & , & \begin{array}{|c|} \hline q_2 & \diamond & \diamond \\ \hline \end{array} \\ (1) & & (2) & & (3) & & (4) \end{array} \quad (5.22)$$

Die erste Menge A_\diamond enthält die Punkte, die das Symbol \diamond haben. Außerdem sind die Elemente von A_\diamond miteinander durch die Beziehung \leftrightarrow verbunden. Die gleiche Aussage gilt für die Menge A_\clubsuit . Daraus folgt,

$$\text{entweder } a \in A_\diamond \Rightarrow A_\diamond \subseteq A \quad \text{oder} \quad a \in A_\clubsuit \Rightarrow A_\clubsuit \subseteq A. \quad (5.23)$$

Aus 5.22 ist:

$$\begin{aligned} &\{q_1, p, q_2\} \subseteq \hat{S}(A_\diamond) \quad \text{und} \quad \{q_1, p, q_2\} \subseteq \hat{S}(A_\clubsuit) \\ &\Rightarrow \{q_1, p, q_2\} \subseteq \hat{S}(A) \end{aligned}$$

Ebenso können wir beweisen, dass

$$\{\mathfrak{Z}_p^k(q_1), \quad k \in N\} \subseteq \hat{S}(A) \Rightarrow K \subseteq \hat{S}(A). \quad \square$$

Definition 5.2.11. Für eine Menge $A \subset \Omega - \mathfrak{R}$ definieren wir die folgenden Funktionen

- $IS(A) = \hat{S}(A) - [\hat{S}(A) \cap \mathfrak{R}]$.

- $dS(A) = \hat{S}(A) - A.$
- $dIS(A) = IS(A) - A.$

Definition 5.2.12. Wir nennen die nichtleere Menge $A \subset \Omega$ **innere berandete Menge**, wenn A eine Äquivalenzklasse der Äquivalenzrelation \Leftrightarrow ist und $(1, 1) \notin A$.

Definition 5.2.13. Wir nennen die Teilmenge $A \subset \Omega$ **äußere Menge**, wenn A eine Äquivalenzklasse der Äquivalenzrelation \Leftrightarrow ist und $(1, 1) \in A$.

Lemma 5.2.14. Wenn A eine Äquivalenzklasse der Äquivalenzrelation \Leftrightarrow ist und $p \in A$, dann existiert eine positive ganze Zahl $n \leq |\Omega|$, so dass dann gilt

$$A = IS^n(\{p\}), \quad (5.24)$$

mit $IS^1(B) = IS(B)$, $IS^{k+1}(B) = IS[IS^k(B)]$, $k \in \mathbb{N}$, $B \subseteq \Omega$.

Beweis

Ω ist eine endliche Menge und $IS^n(\{p\}) \subseteq IS^{n+1}(\{p\})$. Außerdem gilt

$$IS^{n+1}(\{p\}) = dIS[IS^n(\{p\})] \cup IS^n(\{p\}).$$

Daraus folgt, dass $\exists n \in \mathbb{N}$ mit $n \leq |\Omega| = N \times M$, mit $dIS^n(\{p\}) = \emptyset$.

Das ergibt, dass $dS(A) = dS[IS^n(\{p\})]$ und das bedeutet, dass $A = IS^n(\{p\})$.

□

Zusammenfassung: Wir haben gesehen, dass die Menge $\Omega - \mathfrak{R}$ aus Äquivalenzklassen (bzw. inneren Mengen und einer einzigen äußeren Menge) besteht. Das werden wir benutzen, um die Anfangswerte einer Gaszone (eine innere Menge) anzugeben. Es ist ausreichend einen Punkt aus der Gaszone zu kennen, um alle Punkte der gesamten Gaszone zu bestimmen.

Sei A eine Äquivalenzklasse und $p \in A$. Ein Algorithmus, um alle Elemente von A zu bestimmen, wird im Folgenden dargestellt:

```

B = {p};   dB = B;
while (|dB| > 0) do
  A = B ∪ IS(dB);
  dB = A - B;
  B = A;
end

```

5.2.2 Allgemeine Modelle

Bis jetzt haben die Modelle, die die Voraussetzungen (1) erfüllen, betrachtet. Die Ränder dieser Modelle können keine rechten Winkel besitzen. Wenn es einen rechten Winkel gibt, dann existiert ein Randpunkt, der mehr als 2 Randnachbarn hat.

$Board$ ist die Haupt-Matrix eines Modells, bei dem einige Randpunkte mehr als 2 Randnachbarn haben. $Board'$ ist die Matrix, die aus der Matrix $Board$ unter Verwendung der folgenden Matrixumwandlungen hervorgeht

$$A_{i,j} = \begin{pmatrix} Board_{i,j} & Board_{i,j+1} \\ Board_{i+1,j} & Board_{i+1,j+1} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

mit

$$\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right\} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad and \quad \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right\} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

Wenn die Matrix $Board'$ und ihre Randmenge die **Voraussetzungen (1)** erfüllen, dann gilt das Lemma 5.2.14 für die Matrix $Board$ und ihre Randmenge. Außerdem haben $Board$ und $Board'$ die selbe Anzahl von Rand-Ketten, und die Ketten von $Board$ kann man leicht mit Hilfe der Ketten von $Board'$ bestimmen.

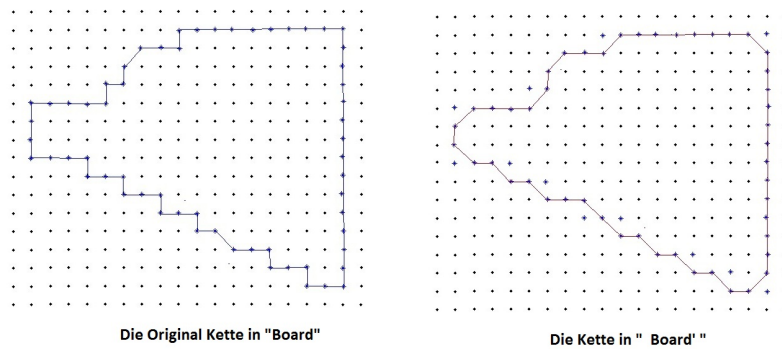


Abbildung 5.3: Die Ketten in $Board$ und die umgewandelte Matrix $Board'$

5.2.3 Membran-Punkte (Membran-Linie)

Manche Experimente, z.B. *The shock tube problem* brauchen eine dünne Schicht zwischen zwei verschiedenen Gasbereichen. Man entfernt diese dünne Schicht schlagartig und betrachtet die Gasbewegung und die Gasverteilung über die Zeit. Dafür müssen wir die dünne Schicht (Membran-Punkte) definieren (siehe Abbildung 5.4). Die Membran-Punkte werden für die Formulierung der Anfangsbedingung gebraucht. Diese Punkte betrachten wir nur am Anfang.

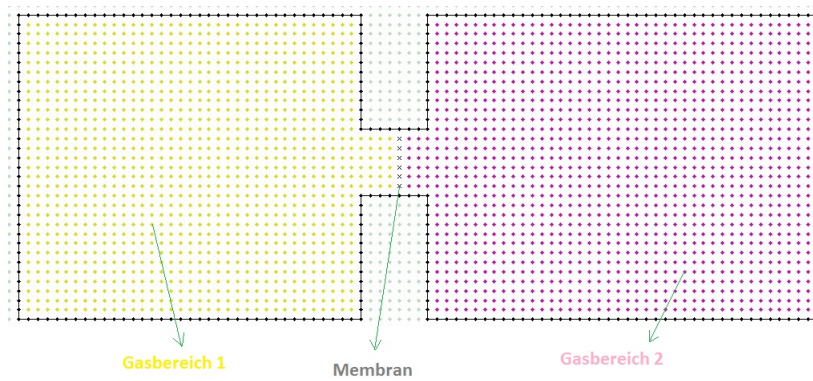
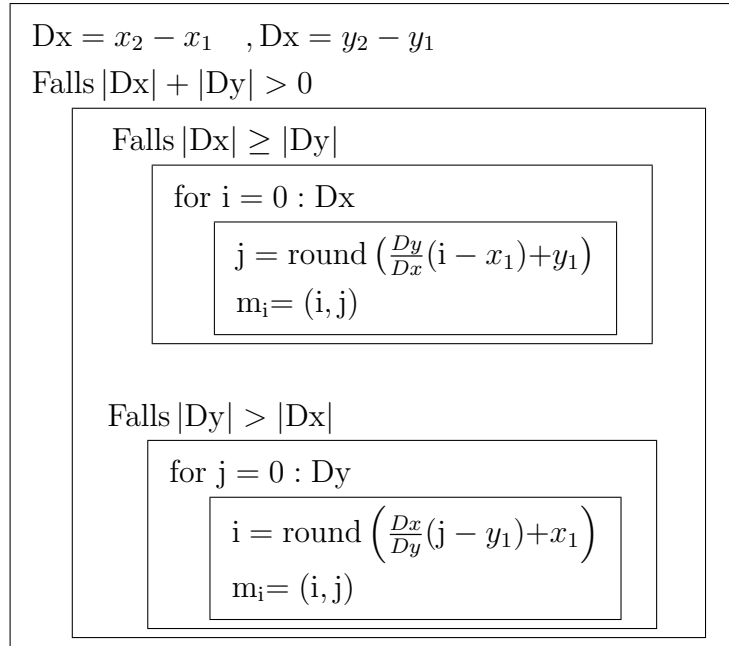


Abbildung 5.4: Membran zwischen zwei Gasbereichen

Die Membran-Punkte können die Diskretisierung einer beliebigen Kurve sein. In unserem Programm betrachten wir nur die Membran, die eine diskretisierte lineare Strecke zwischen zwei Punkten (z.B. $p1 = (x_1, y_1), p2 = (x_2, y_2)$) ist. Die diskretisierte Approximation der Linie ist durch die Punkte

$$m_0, \dots, m_n, \quad n = \max(|x_2 - x_1|, |y_2 - y_1|),$$

gegeben, die im Folgenden definiert werden.



Lemma 5.2.15. Für $p1 = (x_1, y_1), p2 = (x_2, y_2) \in \Omega$ und die Punkte

$$m_0, \dots, m_n, \quad n = \max(|x_2 - x_1|, |y_2 - y_1|),$$

die oben definiert sind, gilt:

$$\forall r \in \{1, \dots, (n-1)\} \Rightarrow S(m_r) \cap \{m_0, \dots, m_n\} = \{m_{r-1}, m_r, m_{r+1}\}.$$

Beweis: Den Beweis überlassen wir dem Leser.

Hinweis 5.2.16.

1. Die Membran-Punkte können die Äquivalenzklasse der Äquivalenzrelation $\hat{\leftrightarrow}$ zerlegen. (Das möchten wir nicht beweisen, da der Beweis sehr ähnlich wie oben ist.)
2. Die Membran-Punkte werden nur betrachtet, wenn sie nicht Rand- oder Wandpunkte sind.
3. Die Membran-Punkte werden nur am Anfang betrachtet.

4. Der Anfangswert eines Membran-Punktes p ist der Anfangswert eines Gas-Punktes q , wobei $q \in S(p)$.

Zusammenfassung und Eingabefunktionen: Wir möchten hier durch ein Beispiel beschreiben, wie wir die obige theoretische Arbeit in einer Software angewendet haben. Im Folgenden möchten wir das Modell, das in dem Bild 5.5 gespeichert ist, betrachten.

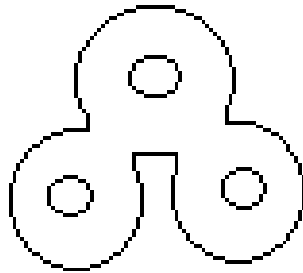


Abbildung 5.5: Eingabebild zur Ermittlung der Randbedingungsgeometrie

Das Programm liest das Bild. Danach erzeugt es ein diskretisiertes Modell bzw. die Hauptmatrix. Nach dem Lesen des Bildes durch das Programm, erhält man das diskretisierte Modell (siehe Bild 5.6) gegeben. Dieses Modell enthält vier Rand-Ketten, eine äußere Menge und vier innere Mengen. Wir können 6 Knöpfe sehen, die uns beim

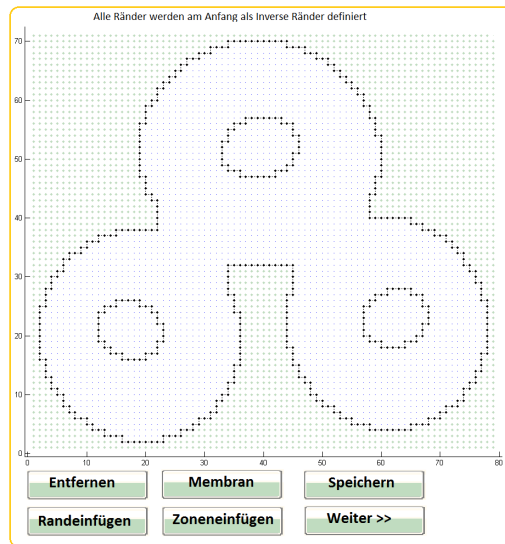


Abbildung 5.6: Das diskretisierte Modell

Eingeben helfen.

Der Zoneneinfügen-Knopf ermöglicht es uns, durch die Wahl eines Punkt mit dem Mauszeiger eine Zone zu wählen. Danach wird diese Zone entweder als Gas- oder als Wandzone definiert.

Wenn wir auf den Randeinfügen-Knopf drücken, können wir eine Punktserie von einer Rand-Kette wählen. Dafür müssen wir den Anfangs-, den Endpunkt und die Richtung mit dem Mauszeiger bestimmen. Danach gibt es die Möglichkeit, eine Randbedingung für diese Punktserie auszuwählen.

Durch den Membran-Knopf können wir eine Membran-Linie einfügen. Dafür müssen wir einen Anfangs- und Endpunkt mit dem Mauszeiger auswählen.

Anfangswerte

Das Bild 5.7 zeigt, wie der Anfangswert eingegeben werden kann. Dafür braucht man nur einen Punkt aus einer inneren Menge zu wählen. Es gibt auch die Möglichkeit eine innere Menge als Wandgebiet oder Gasgebiet zu betrachten.

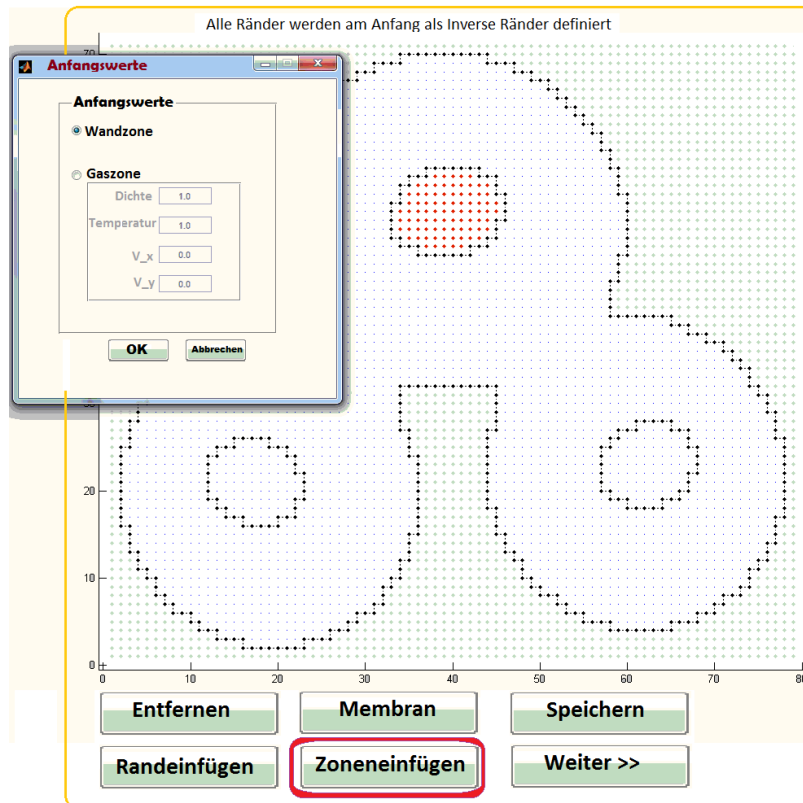


Abbildung 5.7: Die Eingabe des Anfangswertes

Membran: Bild 5.8 zeigt, dass die Membran-Punkte die inneren Gebiete in verschiedene Teilgebiete zerlegen können.

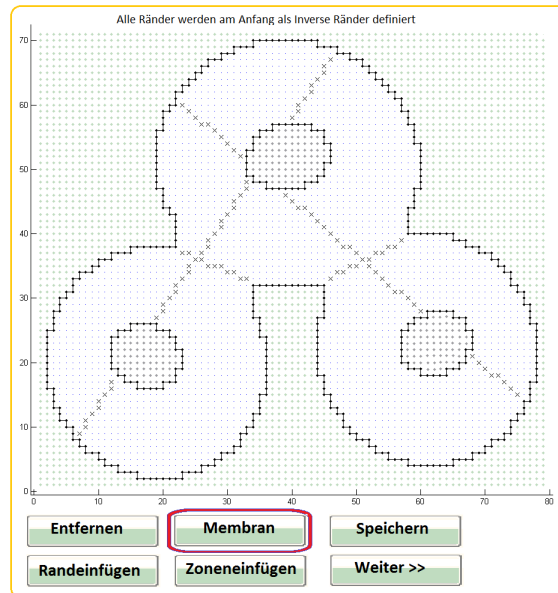


Abbildung 5.8: Membran-Eingaben

Gaszonen: Im Bild 5.9 haben wir die Anfangswerte der Gas-Zonen, die durch die Ränder und die Membranen begrenzt werden.

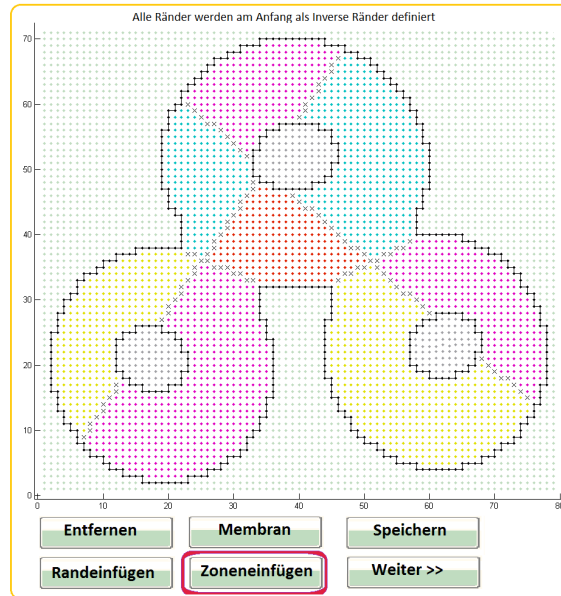


Abbildung 5.9: Definition der Gaszone

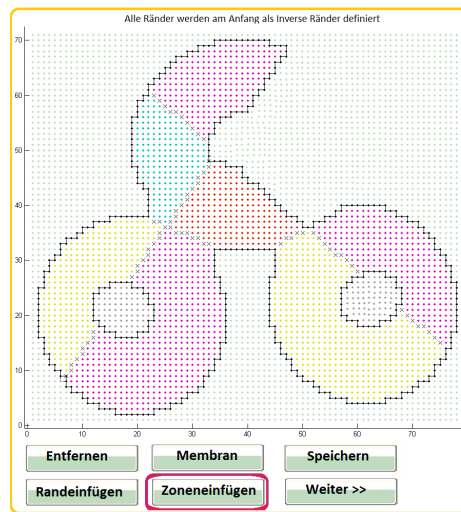


Abbildung 5.10: Neue Wandzone erstellen

Wand-Zonen: Wenn eine Gaszone als Wandzone definiert ist, werden die Membran-Punkte der Zone als neue Ränder betrachtet. Siehe Bild [5.10](#)

Randbedingungen: In diesem Programm kann man mit einfacher Methode die Randbedingungen eingeben. Das Bild 5.12 zeigt verschiedene Randbedingungen, die das Programm simulieren kann.

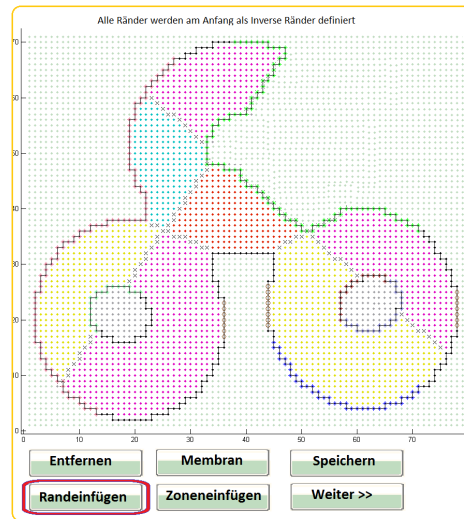


Abbildung 5.11: Randbedingungen

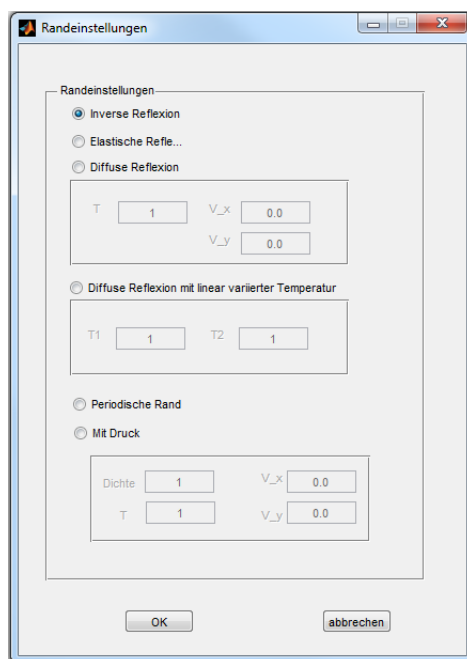


Abbildung 5.12: Verschiedene Randbedingungen

5.3 Die Diskretisierung der Transport-Gleichung

Hier möchten wir eine numerische Lösung der Transport-Gleichung 5.5 nach einem Zeitschritt Δt finden. Seien der diskretisierte endliche Geschwindigkeitsraum $G_d \subset \mathbb{Z}^d$, k der Zeitschritt und s der Ortsschritt. Wir definieren die größte Komponente v_{mx} :

$$v_{mx} := \max_{v \in G_d} \bigcup \{ \|v\|_\infty \}. \quad (5.27)$$

Die Richtungsableitung einer stetigen differenzierbaren Funktion in Richtung eines Vektors $v \neq 0$ ist definiert durch:

$$D_v f(p) := v \cdot \nabla_x f(p) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\frac{f(p) - f(p - \delta \cdot v)}{\delta} \right). \quad (5.28)$$

Im Folgenden werden wir die Formel:

$$\left(\frac{f(p) - f(p - \delta \cdot v)}{\delta} \right),$$

wobei $\delta > 0$, als Approximation von $v \cdot \nabla_x f(p)$ betrachten. Damit der Punkt $p_v := (p - \delta \cdot v)$ im Quadrat $pp_1p_2p_3$ (die Punkte p_1, p_2, p_3 sind Nachbarn von p) liegt,

wählen wir:

$$\delta \cdot \|v\|_{\infty} \leq s.$$

Daraus folgt

$$\delta \leq \frac{s}{v_{mx}}.$$

Wie im Bild 5.13 dargestellt, sind die Punkte p_1, p_2, p_3 Nachbarpunkte von p , so dass p_v ein Punkt im Quadrat $p p_1 p_3 p_2$ ist.

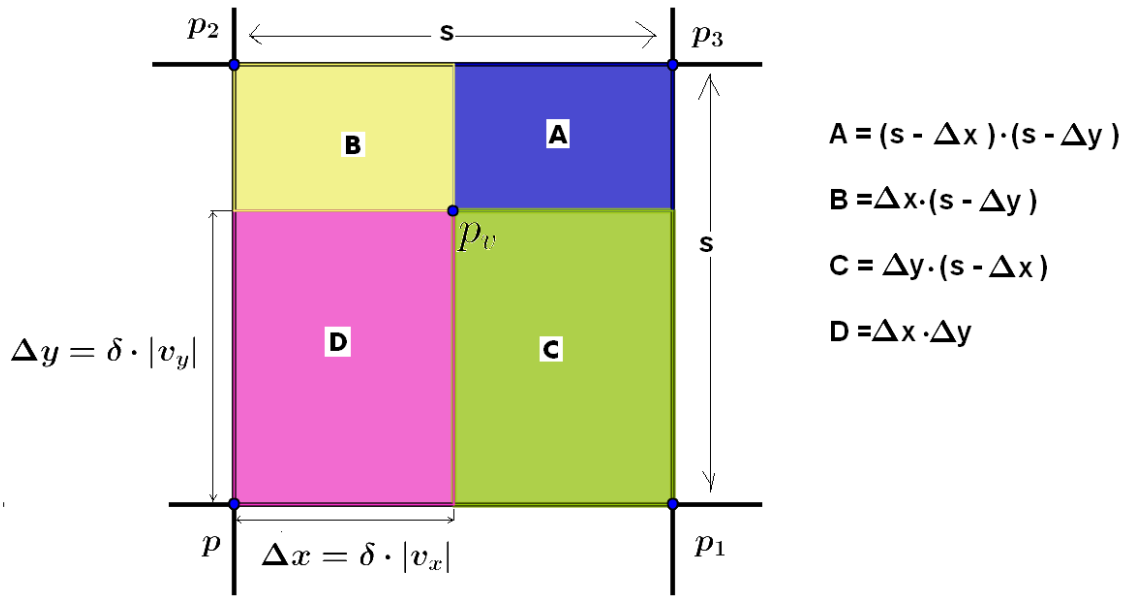


Abbildung 5.13: Lösung der Transport-Gleichung

Wir möchten die Transport-Gleichung mit Hilfe des Euler-Verfahrens lösen. Dann ist die diskretisierte Transport-Gleichung:

$$\frac{h(\Delta t, p, v) - h(0, p, v)}{\Delta t} + \frac{h(0, p, v) - h(0, p_v, v)}{\delta} = 0.$$

Die Euler-Approximation ist:

$$h(\Delta t, p, v) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\delta}\right) \cdot h(0, p, v) + \frac{\Delta t}{\delta} \cdot h(0, p_v, v). \quad (5.29)$$

Jetzt lautet die Frage, wie wird $h(0, p_v, v)$ berechnet?

Eine Approximation von $h(0, p_v, v)$ kann durch eine Interpolation mit Hilfe der Funktionswerte an den Punkten p, p_1, p_2, p_3 berechnet werden. Als Beispiel ist die Bilinearform $P(0, p_v, v)$ in $\Delta x, \Delta y$ durch die Punkte $(p, h(0, p, v))$ und $(p_i, h(0, p_i, v))$;

$i = 1, 2, 3$:

$$P(0, p_v, v) := \frac{1}{s^2} [A \cdot h(0, p, v) + B \cdot h(0, p_1, v) + C \cdot h(0, p_2, v) + D \cdot h(0, p_3, v)], \quad (5.30)$$

wobei

$$\begin{aligned} A &= (s - \Delta x) \cdot (s - \Delta y) \quad , \quad B = \Delta x \cdot (s - \Delta y) \\ C &= \Delta y \cdot (s - \Delta x) \quad , \quad D = \Delta x \cdot \Delta y. \end{aligned}$$

Die Formel 5.30 kann man in ein Polynom(in $\Delta x, \Delta y$) umformulieren:

$$\begin{aligned} P(0, p_v, v) &= h(0, p, v) + \\ &+ \frac{h(0, p_1, v) - h(0, p, v)}{s} \Delta x + \frac{h(0, p_2, v) - h(0, p, v)}{s} \Delta y + \\ &+ \frac{h(0, p, v) - h(0, p_1, v) - h(0, p_2, v) + h(0, p_3, v)}{s^2} \Delta x \Delta y. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Daraus folgt, dass die Gleichung 5.29 folgendermaßen umgeschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} h(\Delta t, p, v) &= (1 - [\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3]) h(0, p, v) + \\ &\quad \alpha_1 h(0, p_1, v) + \alpha_2 h(0, p_2, v) + \alpha_3 h(0, p_3, v), \end{aligned} \quad (5.32)$$

wobei $\alpha_1 = \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{B}{s^2}, \quad \alpha_2 = \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{C}{s^2}, \quad \alpha_3 = \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{D}{s^2}.$

Die Formel 5.32 werden wir in den Algorithmen benutzen.

Hinweis 5.3.1. 1. Die obige Methode ist von erster Ordnung.

2. Wenn z. B. $v_y = 0$, gilt $C = D = 0$, das heißt, dass p_2, p_3 keine Rolle spielen, um $h(p_v)$ zu bestimmen. In diesem Fall gilt:

$$v_y = 0 \quad \Rightarrow \quad P(0, p_v, v) = \frac{s - \Delta x}{s} h(0, p, v) + \frac{\Delta x}{s} h(0, p_1, v).$$

Dasselbe können wir feststellen wenn $v_x = 0$

$$v_x = 0 \quad \Rightarrow \quad P(0, p_v, v) = \frac{s - \Delta y}{s} h(0, p, v) + \frac{\Delta y}{s} h(0, p_2, v).$$

3. Die Gleichung 5.31 besteht aus den ersten vier Komponenten der Taylorreihe von $f(0, p, v)$. Wenn wir den letzten Teil weglassen, wird p_3 keine Rolle beim Berechnen von $f(p_v)$ spielen. Außerdem wird die Transport-Gleichung:

$$\begin{aligned} h(\Delta t, p, v) &= (1 - \gamma_1 - \gamma_2) \cdot h(0, p, v) + \gamma_1 \cdot h(0, p_1, v) + \gamma_2 \cdot h(0, p_2, v) \\ \text{womit} \quad \gamma_1 &:= \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{\Delta x}{s}, \quad \gamma_2 := \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{\Delta y}{s}. \end{aligned}$$

4. Für die **Nichtnegativität** des Verfahrens muss der Koeffizient von $h(\Delta t, p, v)$ in 5.32 nur positiv sein (Wenn einige Koeffizienten negativ sind, kann die Stabilität des Verfahrens beeinträchtigt werden). Daraus folgt

$$\begin{aligned}
 1 - \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 &> 0 \quad \Rightarrow \\
 1 - \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 &= 1 - \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{(B+C+D)}{s^2} \\
 &\geq 1 - \frac{\Delta t}{\delta} \cdot \frac{\overbrace{(A+B+C+D)}^{=s^2}}{s^2} = 1 - \frac{\Delta t}{\delta} \quad \Rightarrow \\
 1 - \frac{\Delta t}{\delta} &> 0 \Rightarrow \Delta t < \delta \leq \frac{s}{v_{mx}}.
 \end{aligned}$$

5. **Auf und in der Nähe von Rändern** trifft man Fälle, bei denen einige p_i Wandpunkte sind (siehe die Abb. 5.14). In diesen Fällen ist es unmöglich, dass der Wert von $h(0, p_v, v)$ wie oben berechnet werden kann, weil die Funktion h auf der Wand nicht definiert ist. Um dieses Problem zu lösen, möchten wir zwei

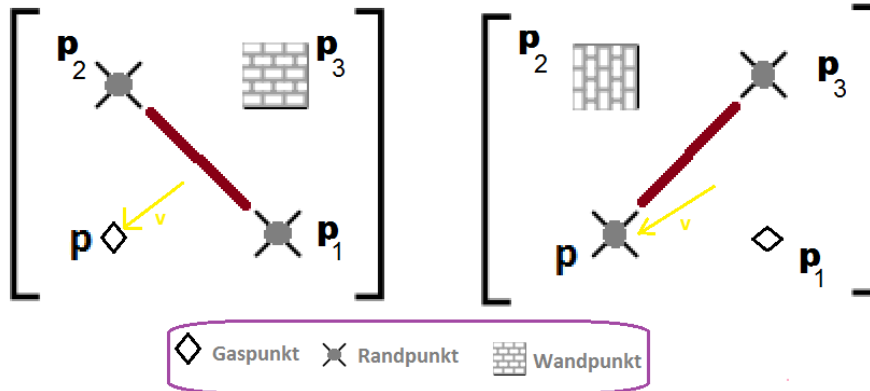


Abbildung 5.14: Punkte in der Nähe von der Wand.

Methoden vorschlagen:

- A: Falls einer von den Punkten p_i ein Wandpunkt ist, müssen wir eine andere Approximation von $h(0, p_v, v)$ suchen. Aber das hängt von der jeweiligen Situation ab (siehe Abb. 5.14). Diese Methode möchten wir nicht in unserem Programm benutzen, weil sie sehr viele Fälle haben kann, die betrachtet werden müssen.
- B: In 5.2.2 haben wir über die allgemeinen Modelle gesprochen, bei denen die Ränder rechte Winkel haben dürfen. Jetzt können wir alle diagonalen Ränder durch die Matrix-Transformationen, die auf dem Bild 5.15 dargestellt

sind, vermeiden. Diese Methode möchten wir in unserem Programm verwenden, weil diese Methode zwei wichtige Eigenschaften hat:

- a) Erster Vorteil beim Lösen der Transportgleichung ist, dass man hier keine besonderen Fälle zu betrachten braucht.
- b) Der zweite Vorteil liegt bei der Modellierung der Ränder, insbesondere bei den elastischen Ränder. Wenn wir die diskretisierte tangential Linie an einem Randpunkt als die Linie zwischen seinem Rand-Nachbarnpunkten betrachten, ist unser Geschwindigkeitsraum symmetrisch bezüglich dieser Tangente und die Steigungswinkel der Tangenten sind aus $\{k \cdot \frac{\pi}{4} : k = 0, 1, 2, 3\}$. Das vereinfacht die elastischen Randbedingungen zu implementieren, wie wir später sehen werden.

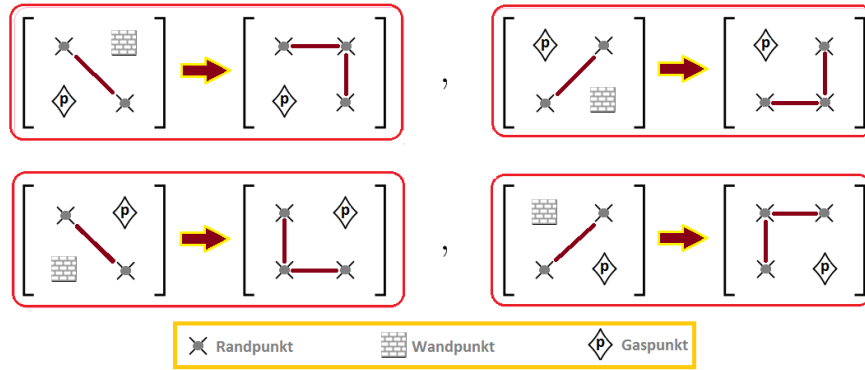


Abbildung 5.15: Matrix-Transformationen

Jetzt möchten wir über die Modellierung der Randbedingungen diskontieren. Die folgenden Definitionen sind wichtig in den folgenden Schritten.

Definition 5.3.2. Ein Punkt $q \in [1, N] \times [1, M]$ (q muss kein Gitterpunkt sein) heißt **Innenpunkt** falls er eine der folgenden Bedingungen erfüllt:

1. $q \in \Omega$ und q ist kein Wandpunkt.
2. Wenn q kein Gitterpunkt ist und innerhalb der von 2 oder 3 Punkten $p_i \in \Omega$ aufgespannten konvexen Menge (Simplex) liegt, wobei $p_i \in \Omega$ paarweise Nachbarpunkte und keine Wandpunkte sind.

Definition 5.3.3. Ein Punkt q heißt **Außenpunkt**, falls er kein Innenpunkt ist.

Definition 5.3.4. 1. Die Menge W ist die Menge aller Außenpunkte (Wandpunkte).

2. Die Menge W° ist die Menge aller Innenpunkte (Gaspunkte).

5.4 Diskretisierung der Randbedingungen

In diesem Teil möchten wir die Randbedingungen, die im Grundlagenkapitel (Kapitel 2) dargestellt sind, implementieren.

Bei den masserhaltenden Rändern wird keine Masse von $p_v = p - \delta v$ nach p (p ist ein Randpunkt) fließen, wenn p_v ein Außenpunkt ist.

Die Transport-Gleichung spielt in diesem Fall keine Rolle beim Berechnen von $h(\Delta t, p, v)$, sondern der Wert wird durch die Funktion $h(\Delta t, p, v)$ durch die Randbedingungen berechnet.

Sei G_d der Geschwindigkeitsraum. Für einen Randpunkt p definieren wir die folgenden Geschwindigkeitsmengen:

1. G_p^{In} enthält die Geschwindigkeiten v , die in Richtung Gasgebiet (Innen) zeigen, und die $-v$, die nach Außen zeigen (siehe das Bild 5.16).

$$G_p^{In} = \left\{ v \in G_d; \exists \varepsilon \in (0, \frac{s}{2 \cdot v_{mx}}) : (p - \varepsilon \cdot v) \in W^\circ \wedge (p + \varepsilon \cdot v) \in W \right\}. \quad (5.33)$$

2. G_p^{Aus} enthält die Geschwindigkeiten v , die nach Außen zeigen, und die $-v$, die nach Innen zeigen (siehe das Bild 5.16).

$$G_p^{Aus} = \left\{ v \in G_d; \exists \varepsilon \in (0, \frac{s}{2 \cdot v_{mx}}) : (p - \varepsilon \cdot v) \in W \wedge (p + \varepsilon \cdot v) \in W^\circ \right\}. \quad (5.34)$$

3. G_p^{Pass} enthält die Geschwindigkeiten v , wobei v und $-v$ nur nach Innen zeigen dürfen (siehe das Bild 5.16).

$$G_p^{Pass} = \left\{ v \in G_d; \exists \varepsilon \in (0, \frac{s}{2 \cdot v_{mx}}) : (p - \varepsilon \cdot v) \in W^\circ \wedge (p + \varepsilon \cdot v) \in W^\circ \right\}. \quad (5.35)$$

4. G_p^{AusAus} sind die Geschwindigkeiten v , wobei v und $-v$ nur nach Außen zeigen dürfen (siehe das Bild 5.16).

$$G_p^{AusAus} = \left\{ v \in G_d; \exists \varepsilon \in (0, \frac{s}{2 \cdot v_{mx}}) : (p - \varepsilon \cdot v) \in W \wedge (p + \varepsilon \cdot v) \in W \right\}. \quad (5.36)$$

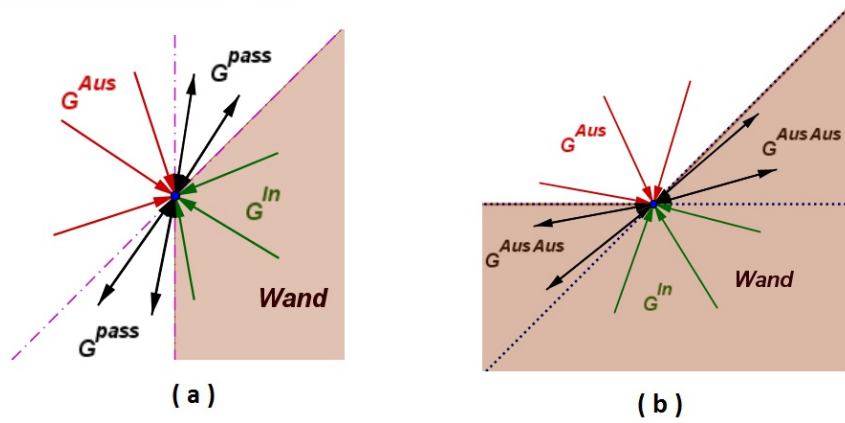


Abbildung 5.16: Die Geschwindigkeitsverteilung am Rand

5.4.1 Randbedingungen-Strategie

Wir möchten die Transportgleichung 5.29 an einem Randpunkt p betrachten.

$$h(\Delta t, p, v) = \underbrace{\left(1 - \frac{\Delta t}{\delta}\right)}_{\beta} \cdot h(0, p, v) + \underbrace{\frac{\Delta t}{\delta}}_{\alpha} \cdot h(0, p_v, v), \quad (5.37)$$

wobei $p_v = p - \delta \cdot v$. Wir sehen, dass die Transportgleichung von der Geschwindigkeit abhängt. Falls $v \in G_p^{Aus}$, ist $p_v \in W^\circ$. Andererseits, wenn $v \in G_p^{In}$, ist $p_v \in W$. Das heißt, dass $h(\Delta t, p, v)$ durch die Transportgleichung im Fall $v \in G_p^{In}$ nicht berechnet werden kann, sondern $h(\Delta t, p, v)$ durch die Randbedingung berechnet wird. Unsere Strategie wird in folgenden Schritten beschrieben:

1.

$$\forall v \in G_p^{Aus} \Rightarrow h(0, p, v) = 0.$$

2. Auf alle Gaspunkte p und alle Geschwindigkeiten v wird die Transportgleichung angewendet. Daraus folgt, dass $h(\Delta t, p, v)$ berechnet ist.

3. Auf alle Randpunkte p und $\forall v \in G_p^{Aus} \cap G_p^{In}$ wird die Transportgleichung auch angewendet.

4. Die Randbedingung ist jetzt:

$$\forall p \in \mathfrak{R} \ \& \ \forall v \in G_p^{In} \Rightarrow h(\Delta t, p, v) = \beta \cdot h(0, p, v) + R_p(v),$$

wobei $R_p(v)$ von dem Randtyp abhängt. Im Folgenden wird $R_p(v)$ für verschiedene Arten von Rändern untersucht.

- Inverse Randbedingung: Für eine Geschwindigkeit $u \in G_p^{In}$ gilt:

$$R_p(u) := h(\Delta t, p, -u).$$

- Diffuse Randbedingung mit der Randtemperatur T und der Geschwindigkeit c .

Schritt 1:

$$A_p := \sum_{u \in G_p^{Aus}} h(\Delta t, p, u).$$

Schritt 2: Dann wird eine Maxwell-Funktion

$$M_{\hat{T}, \hat{c}}(v) = r \cdot \exp\left(-\frac{(v - \hat{c})^2}{2\hat{T}}\right),$$

mit folgenden Eigenschaften gesucht:

(i)

$$\frac{1}{\langle 1, M_{\hat{T}, \hat{c}}(\cdot) \rangle} \langle V, M_{\hat{T}, \hat{c}}(\cdot) \rangle = c, \quad \frac{1}{d \langle 1, M_{\hat{T}, \hat{c}}(\cdot) \rangle} \langle (V - c)^2, M_{\hat{T}, \hat{c}}(\cdot) \rangle = T.$$

(ii)

$$\sum_{u \in G_p^{In}} M_{\hat{T}, \hat{c}}(u) = 1.$$

Dann gilt:

$$\forall u \in G_p^{In} : R_p(u) = A_p \cdot M_{\hat{T}, \hat{c}}(u).$$

- Elastische Randbedingung: Elastische Reflexion bedeutet, wenn ein Gasteilchen den Rand mit Einfallswinkel θ_1 trifft, fliegt es mit Ausfallwinkel θ_2 zurück, wobei $\theta_1 = \theta_2$. Dann ist $\forall u \in G_p^{In}$

$$R_p(u) := f_p^{\Delta t}(w),$$

womit w die Einfallgeschwindigkeit ist. Es stellt sich nun die Frage, wie man die Einfallgeschwindigkeit im diskretisierten Fall definieren und berechnen kann. Die Geschwindigkeit w hängt von der **Normalen** des Randes ab. Hier möchten wir die Approximation der **Tangente** und der **Normalen** des Randes definieren. Seien p_1, p_2 die Randnachbarpunkte eines Randpunkts p , dann ist die Approxi-

mation der Tangente an p parallel zu p_1p_2 und die Normale ist senkrecht zu p_1p_2 .

Bemerkung: Die Ausfallgeschwindigkeit w ist definiert (bzw. $w \in G^d$), wenn

$$\widehat{p_1 p p_2} = k \frac{\pi}{2}, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

In diesem Fall möchten wir eine allgemeine Formel definieren, um w zu berechnen. Zuerst sei

$$t_p = (e_x, e_y)^T := \frac{p_2 - p_1}{\|p_2 - p_1\|_1}$$

der tangentielle Vektor an p .

(a) Falls $\|t_p\|_2 = 1$, d.h., dass t_p parallel zu einer Achse ist. Das ergibt

$$w = |e_x| \cdot (v_x, -v_y)^T + |e_y| \cdot (-v_x, v_y)^T.$$

Bild 5.17 zeigt ein Beispiel dafür.

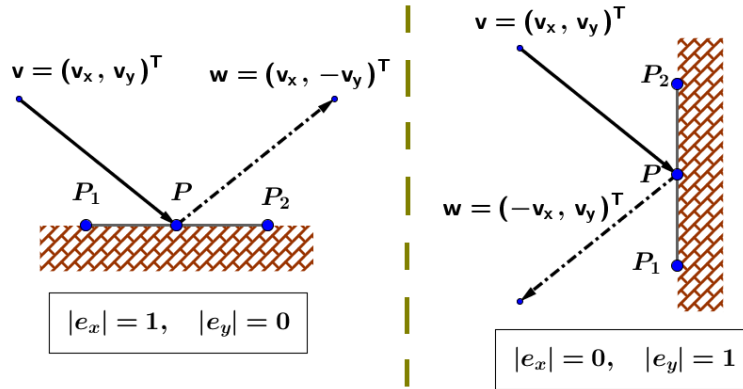


Abbildung 5.17: Elastische Randbedingung im Fall $\|t_p\|_2 = 1$.

(b) Falls $\|t_p\|_2 = \sqrt{2}$ ist, d.h., dass der Anstiegswinkel von t_p die Form

$$\frac{\pi}{4} + k \frac{\pi}{2}, \quad k \in \mathbb{Z}$$

hat. In diesem Fall ist w wie im Folgenden gegeben:

$$w = |e_x| \cdot (v_x, -v_y)^T + |e_y| \cdot (-v_x, v_y)^T.$$

Im Bild 5.18 ist dafür ein Beispiel zu sehen.

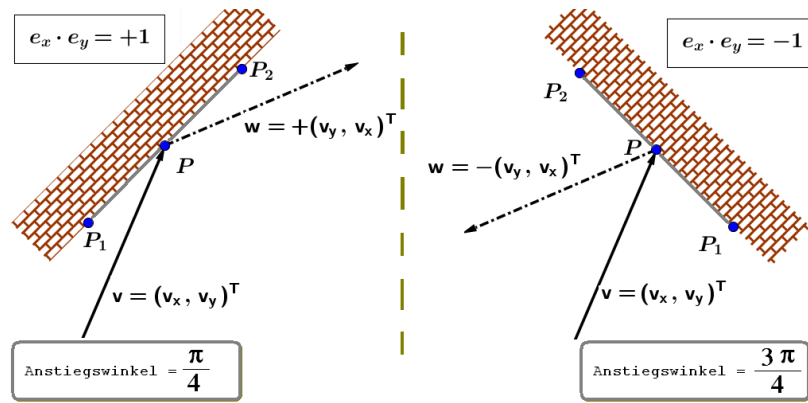


Abbildung 5.18: Elastische Randbedingung im Fall $\|t_p\|_2 = \sqrt{2}$

Hinweis 5.4.1. Wenn t_p einen Anstiegswinkel $\alpha \neq k\frac{\pi}{4}$, $k \in \mathbb{Z}$ hat, wird die gesamte einströmende Masse, die auf der linken (rechten) Seite der Normalen von p ankommt, durch die Diffuse-Verteilung (mit Randnähe-Temperatur) auf der rechten (linken) Seite der Normalen reflektiert (siehe das Bild 5.19).

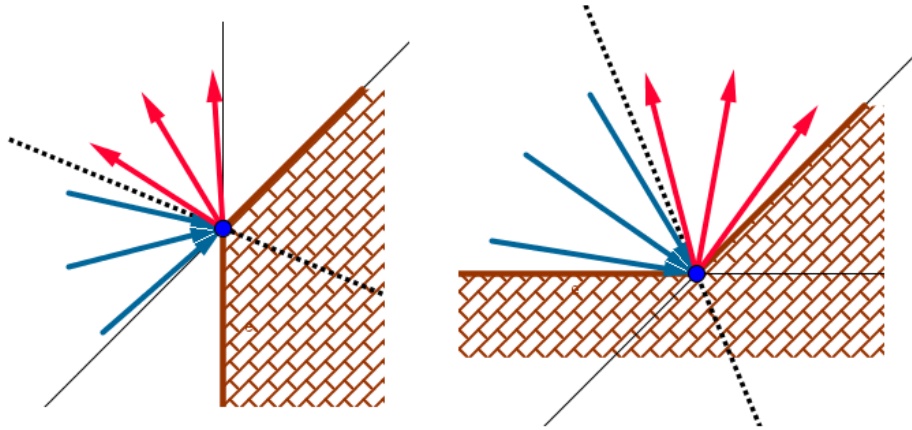


Abbildung 5.19: Elastische Randbedingung im Fall $\|t_p\|_2 = \frac{\sqrt{5}}{2}$.

Fest vorgegebene Eingangsströmung

Die fest vorgegebene Eingangsströmung bedeutet, dass der Rand an der Randstelle p aus einem Gasbereich besteht, der eine konstante Dichte r , feste Temperatur T und die Erwartungsgeschwindigkeit \bar{v} hat.

Wir suchen eine Maxwell-Funktion

$$E(v) = c \cdot e^{-\frac{(v-\bar{v})^2}{T}}$$

mit den folgenden Eigenschaften:

$$\begin{aligned}\langle 1, E(v) \rangle &= r \\ \langle v, E(v) \rangle &= r \cdot \bar{v} \\ \frac{1}{3} \langle (v - \bar{v})^2, E(v) \rangle &= r \cdot T\end{aligned}.$$

In diesem Fall lautet die Randbedingung:

$$h(\Delta t, p, v) := E(v), \quad \forall v \in G_n.$$

Periodische Randbedingung

Die periodischen Randbedingungen sind anwendbar, wenn das Gasgebiet aus ähnlichen Teilgebieten besteht. Diese Art von Rändern ist sinnvoll für unbeschränkte Gasgebiete z.B. die unendliche Gasröhre, deren Ränder sich wiederholen. Im Fall von beschränkten Gebieten können die periodischen Randbedingungen die Rechenzeit verkürzen und die Auflösung vergrößern.

Wir betrachten hier erstmal nur die periodischen Ränder, die Geraden sind und nur vertikal oder horizontal sind. In diesem Fall haben wir zwei Randteile, die periodisch definiert sind. Jeder Punkt eines Teiles hat einen gegenüberliegenden Punkt aus dem zweiten Teil:

$$p_1 \leftrightarrow p_2,$$

$$v \in G_{p_1}^{Aus} \Rightarrow h(0, v, p_1) = h(0, v, p_2), \quad (5.38)$$

$$v \in G_{p_2}^{Aus} \Rightarrow h(0, v, p_2) = h(0, v, p_1).$$

Hinweise:

•

$$G_{p_1}^{In} = G_{p_2}^{Aus} \ \& \ G_{p_2}^{In} = G_{p_1}^{Aus}$$

- Wenn ein Teil des periodischen Randes durch eine Drehung (mit einem Winkel

$\alpha = k\frac{\pi}{2}$) und Abzug aus dem ersten Teil berechnet wird, so gilt:

$$\begin{aligned} G_{p_2}^{Aus} &= Rot_{\alpha}(G_{p_1}^{In}) \\ G_{p_2}^{in} &= Rot_{\alpha}(G_{p_1}^{Aus}) \end{aligned} \quad (5.39)$$

dann ist:

$$\begin{aligned} v \in G_{p_2}^{Aus} &\Rightarrow h(0, v, p_2) = h\left(0, Rot_{\alpha}(v), p_1\right) \\ v \in G_{p_1}^{Aus} &\Rightarrow h(0, v, p_1) = h\left(0, Rot_{-\alpha}(v), p_2\right) \end{aligned} \quad (5.40)$$

Das Bild 5.20 zeigt periodische Ränder für ein Gasgebiet zwischen zwei Zylindern mit unterschiedlichen Temperaturen. Im ersten Fall berechnen wir mit Hilfe der periodischen Ränder nur die Hälfte des Gebiets, wobei der Drehungswinkel $\alpha = \pi$, so braucht man nur die Hälfte des Gebiets zu betrachten. Im zweiten Fall betrachten wir ein Viertel des Gasgebietes, und dieses Mal ist der Winkel $\alpha = \pi/2$.

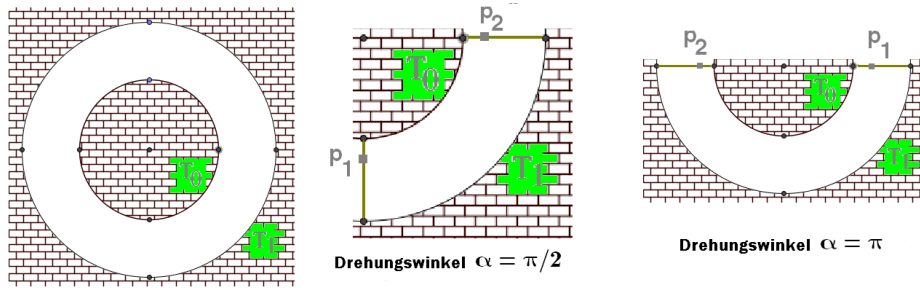


Abbildung 5.20: Periodische Ränder für Gasgebiet zwischen zwei Zylindern mit unterschiedlichen Temperaturen

5.5 Die makroskopischen Eingangsgrößen

In diesem Abschnitt werden wir erklären, wie man das bisher betrachtete Modell mit physikalischen Größen verknüpfen kann und wie man physikalische Anfangsbedingungen auf das Modell abbildet.

Geschwindigkeitsraum

Bis jetzt ist unser Geschwindigkeitsraum

$$G_K = \{-K, \dots, -1, 0, 1, \dots, K\}^d,$$

mit $d \in \{2, 3\}$. Außerdem ist die Erwartungsgeschwindigkeit von der Temperatur des Gases abhängig.

Untersuchung: Wir betrachten hier diese Maxwell-Verteilung

$$M(v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{|v|^2}{2T}}.$$

Die Wahrscheinlichkeit $P_{v_{\max}}$, dass ein Gasteilchen eine Geschwindigkeit besitzt, deren Komponenten v_{\max} nicht überschritten werden, ist:

$$P_{v_{\max}} = \frac{\int_{-v_{\max}}^{v_{\max}} \int_{-v_{\max}}^{v_{\max}} \int_{-v_{\max}}^{v_{\max}} M(v) d^3v}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} M(v) d^3v} = \left[\operatorname{erf}\left(\frac{v_{\max}}{\sqrt{2T}}\right) \right]^3.$$

Sei $v_{\max} = \alpha \cdot \sqrt{2T} \implies P_{v_{\max}} = [\operatorname{erf}(\alpha)]^3$, wobei die Funktion $\operatorname{erf}(\cdot)$ im Bild 5.21 beschrieben ist.

Das Bild 5.22 zeigt auch, dass der wesentliche Teil der Maxwell-Verteilung zwischen $(-2\sqrt{2 \cdot T}, +2\sqrt{2 \cdot T})$ liegt.

Jetzt definieren wir für ein α den Diskretisierungsparameter

$$\Delta v = \frac{\alpha \sqrt{2T}}{K} \text{ in } m \cdot s^{-1}$$

und den neuen Geschwindigkeitsraum

$$\tilde{G}_K = \Delta v \cdot G_K.$$

Ortsraum in physikalischen Größen, Ortsschritt Δx und Zeitschritt Δt :

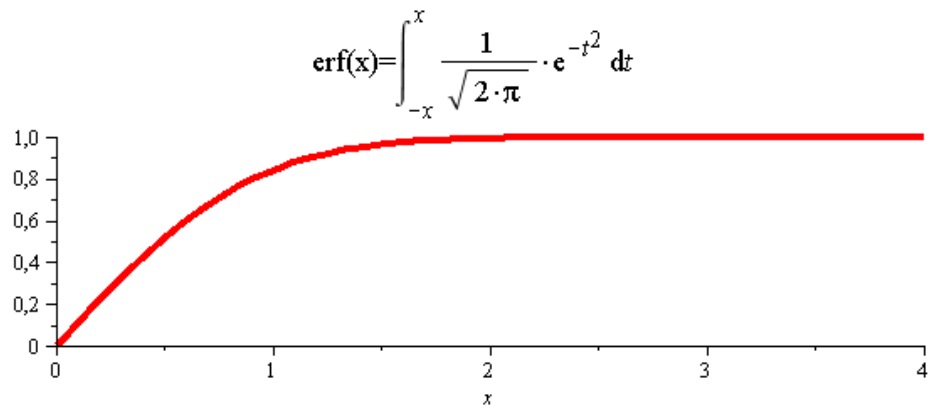
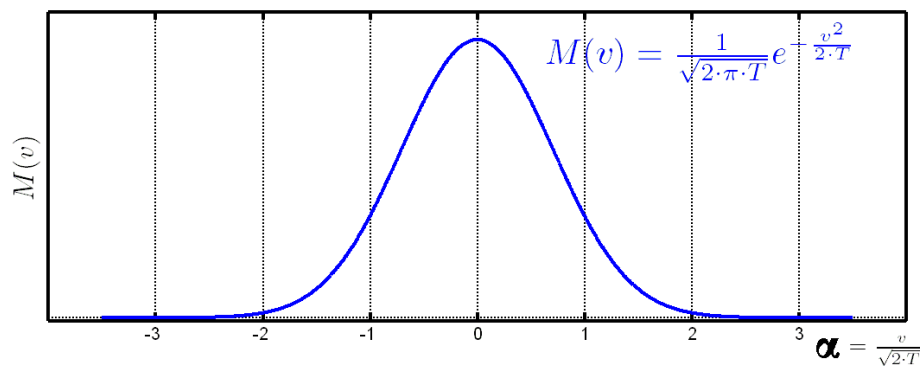
Abbildung 5.21: $\operatorname{erf}(x)$ 

Abbildung 5.22: Maxwellverteilung

Der Diskretisierungsparameter Δx wird in Metern angegeben und der Zeitschritt Δt in Sekunden. Wichtig ist, zu beachten, dass die Courant - Friedrichs - Levy Zahl aus Stabilitätsgründen kleiner als eins ist, und dass die Maximalgeschwindigkeit entlang einer Achse höchstens $v_{max} = \alpha\sqrt{2T}$ beträgt. Dann erhält man mit den betrachteten Bedingungen den Zeitschritt:

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{v_{max}} \text{ in Sekunden.}$$

Makroskopische Größe

Für eine Dichte-Funktion f sind die physikalischen Größen:

Masse

$$\rho = \sum_{v \in \tilde{G}_K} f(v) \cdot (\Delta v)^d, \quad (5.41)$$

Geschwindigkeit

$$\rho \bar{v} = \sum_{v \in \tilde{G}_K} v \cdot f(v) \cdot (\Delta v)^d, \quad (5.42)$$

Druck

$$p = \frac{1}{d} \sum_{v \in \tilde{G}_K} |v - \bar{v}|^2 \cdot f(v) \cdot (\Delta v)^d, \quad (5.43)$$

Temperatur

$$T = \frac{p}{\rho}. \quad (5.44)$$

Anfangswerte

Für alle Punkte $x \in \Omega$, wobei Ω der diskretisierte Ortsraum ist, müssen alle $f_0(x, v)$, $v \in \tilde{G}_K$ mit einer Verteilung, z.B.

$$f_0(x, v) := \frac{c_0(x)}{(2\pi T_0(x))^{d/2}} e^{-\frac{|v - \bar{v}_0(x)|^2}{2T_0(x)}} \quad (5.45)$$

initialisiert werden. Hierbei prägt man dem System mit einer entsprechenden Wahl von $c_0(x)$, $\bar{v}_0(x)$ und $T_0(x)$ eine vorgegebene Masse $\rho_{init}(x)$ in kg , die Geschwindigkeit $\bar{v}_{init}(x)$ in $m \cdot s^{-1}$, sowie einen Druck $p_{init}(x)$ in Pa und damit auch eine Temperatur $T_{init}(x)$ in *Kelvin* auf, und berechnet entsprechend der obigen Gleichungen 5.41, 5.42, 5.43 und 5.44, auf.

Die mittlere freie Weglänge und die Knudsenzahl

Schließlich ist es noch wesentlich, eine spezielle **mittlere freie Weglänge** umzusetzen. Unter der mittleren freien Weglänge zu einer vorgegebenen ortsunabhängigen Geschwindigkeitsverteilung versteht man die Strecke, die ein Gasteilchen im Mittel zurücklegt, bevor es mit einem anderen Teilchen zusammenstößt. Wir werden für einen Geschwindigkeitsraum \tilde{G}_K , eine Stoßmenge R und eine Dichte-Funktion f durch folgenden Algorithmus die mittlere freie Weglänge finden:

- Man berechnet die Wahrscheinlichkeit q_v , dass ein Gasteilchen mit Geschwindigkeit $v \in \tilde{G}_K$ im ersten Zeitschritt Δt mit einem anderen Teilchen zusammenstößt. (Eine Methode, um q_v zu berechnen, wird nach dieser Skizze beschrieben.)
- Danach wird $q_{(v,k)}$ die Wahrscheinlichkeit, dass ein Gasteilchen mit Geschwindigkeit $v \in \tilde{G}_K$ erst im k -ten Zeitschritt mit einem anderen Teilchen zusammenstößt, berechnet:

$$q_{(v,k)} = q_v \cdot (1 - q_v)^{k-1}$$

- M_v ist der Erwartungswert der Anzahl der Zeitschritte (Anzahl der Kollisionen) bis ein Gasteilchen mit Geschwindigkeit $v \in \tilde{G}_K$ mit anderen zusammenstößt:

$$\begin{aligned} M_v &= \sum_{k=1}^{\infty} k \cdot q_{(v,k)} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} k \cdot q_v \cdot (1 - q_v)^{k-1} = \frac{1}{q_v}. \end{aligned}$$

- s_v ist der erwartete Wegabstand, den ein Gasteilchen mit der Geschwindigkeit $v \in \tilde{G}_K$ vor dem Stoß fliegt:

$$s_v = \overbrace{M_v \cdot \Delta t}^{\text{Die erwartete Zeit bis zum Stoß}} \cdot \|v\| = \frac{\Delta t \cdot \|v\|}{q_v} \quad (\text{in Metern.})$$

- Es ergibt sich **die mittlere freie Weglänge** s :

$$s = \sum_{v \in \tilde{G}_K} \frac{f(v)}{\rho} s_v \cdot (\Delta v)^d \quad \text{in Metern}$$

Berechnung von q_v : Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen an der ersten Kollision von $f(v)$ teilnimmt, entspricht dem Teil der Masse $f(v)$, die sich in eine spezielle

Richtung mit einer speziellen Geschwindigkeit v bewegt, der pro Kollision verloren geht bzw. durch Kollisionsvorgänge ersetzt wird. Dies ermittelt man, indem man eine geeignete Gleichgewichtsfunktion e auswählt, und mithilfe dieser den diskretisierten Kollisionsoperator

$$J[f, f](v) = \sum_{\substack{r \in R \\ v \in r}} C_r [f(v')f(w') - f(v)f(w)] \quad (5.46)$$

betrachtet, wobei $vwv'w'$ ein Rechteck $r \in R$ bezeichnet. Wir schreiben J als Summe von Gewinnteil J^+ und Verlustteil J^- :

$$J[f, f](v) = \overbrace{\sum_{\substack{r \in R \\ v \in r}} C_r \cdot f(v')f(w')}^{J^+(v)} - \overbrace{\sum_{\substack{r \in R \\ v \in r}} C_r \cdot f(v)f(w)}^{J^-(v)}.$$

Hierbei ist nur $J^-(v)$ von Interesse, denn dies ist der Teil der Masse, der durch Kollisionen verloren geht bzw. ausgetauscht wird. Hiermit berechnet man den entsprechenden Anteil der Masse $f(v)$ mit

$$q(v) = \frac{\Delta t \cdot J^-(v)}{f(v)}.$$

Hinweis 5.5.1. Eine Methode um die mittlere freie Weglänge zu verkleinern: Wir betrachten mit dem folgendem Kollisionsoperator

$$\hat{J}[f, f] = \lambda \cdot J[f, f]. \quad (5.47)$$

Mit diesem Kollisionsoperator \hat{J} ergibt sich analog zu obigen Betrachtungen:

$$\hat{q}_v = \lambda \cdot q_v \quad , \quad \hat{M}_v = \frac{1}{\hat{q}_v} = \frac{1}{\lambda} M_v \quad \Rightarrow$$

$$\hat{s}_v = \frac{1}{\lambda} s_v \quad \Rightarrow \quad \boxed{\boxed{\hat{s} = \frac{1}{\lambda} s}}.$$

6 Numerische Experimente

Wir zeigen hier, wie die Algorithmen, die wir bis jetzt entwickelt haben, gut in der Praxis funktionieren, und wie einfach es ist, durch unsere Tools, Gasgebiete mit komplexer Geometrie und verschiedenen Randbedingungen zu simulieren. In diesem Kapitel werden wir auch numerische Experimente für die Boltzmann-Gleichung durchführen und die Ergebnisse mit den Ergebnissen anderer numerischer Methoden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung vergleichen.

Zuerst betrachten wir die homogene Boltzmann-Gleichung und als typisches Beispiel dafür das Relaxationsproblem. Dabei werden wir hier die Ruhezustände zwischen zwei Stoßmodellen vergleichen.

Zum zweiten werden wir durch Experimente Modelle mit Stoßoperator und ohne Stoßoperator (freie Flüsse) vergleichen.

Danach werden wir die physikalischen Größen in unseren Experimenten mit den Ergebnissen der vorhandenen Experimente vergleichen; dafür haben wir den "Wärmefluss zwischen zwei Platten" und den "Knudsenminimumeffekt" gewählt.

Außerdem führen wir einige Experimente durch, um diese mit den vorhandenen Methoden qualitativ zu vergleichen. Dafür haben wir "das Shocktubeproblem", "thermische Kriechströmung", und "Shock Front im Kanal" gewählt.

Am Ende machen wir noch einige weitere Experimente, um dadurch zu zeigen, wie gut die Algorithmen sind, um die komplexe Geometrie mit verschiedene Randbedienungen zu simulieren.

6.1 Das Relaxationsproblem

Hier betrachten wir die homogene Boltzmann-Gleichung:

$$\partial_t f(v) = J_R[f, f](v).$$

Wie wissen aus Kapitel 4, dass die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung gegen eine Maxwell-Funktion konvergiert, wenn R eine vollständige Stoßmenge ist. Hier vergleichen wir das Konvergenz-Verhalten, wenn zu Beginn nur Quadrate und dann alle Rechtecke zugelassen werden. In diesem numerischen Beispiel betrachten wir Gas mit der Knudsenzahl $Kn = 1.0$ und den Anfangswerten f_0 (siehe Bild 6.1 (A)). Der diskretisierte Geschwindigkeitsraum ist:

$$G = \{-10, \dots, 0, \dots, 10\}^2.$$

Um die unterschiedlichen Wege der Konvergenz zu untersuchen, betrachten wir die H-Funktion $H(t)$, $M_4(t) = \langle |v|^4, f(t) \rangle$ und $M_{10}(t) = \langle |v|^{10}, f(t) \rangle$.

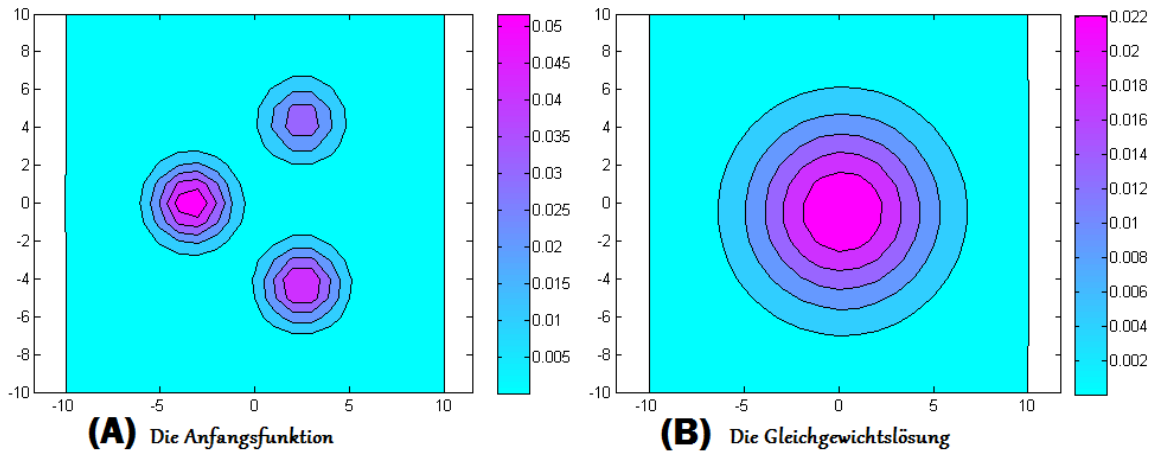


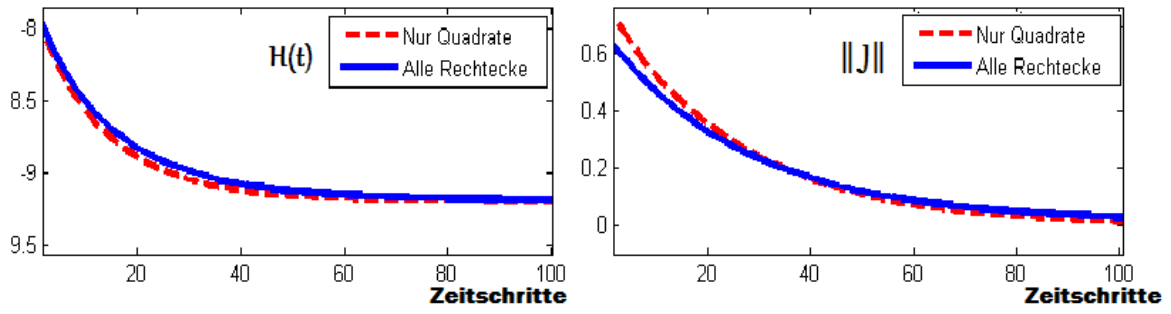
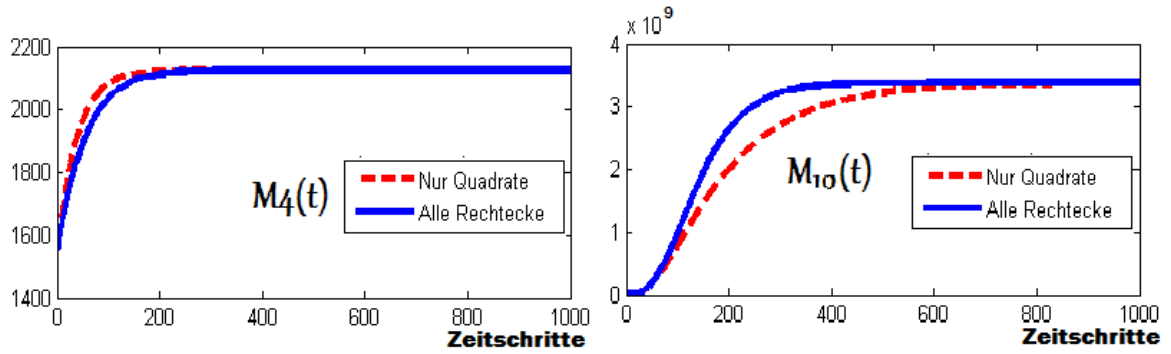
Abbildung 6.1: Das Relaxationsproblem

In dem Bild 6.2 sieht man, dass $H(t)$ gegen ihr Minimum und $\|J\|_1$ gegen 0 konvergier. Dies geschieht für die beiden Stoßmengen auf verschiedenen Wegen. Die Differenz des Konvergenz-Weges ist deutlicher, wenn wir die Momente

$$M_k(t) = \langle |v|^k, f(t) \rangle$$

betrachten.

Der Verlauf mit der Zeit von $M_4(t)$ und $M_{10}(t)$ wird im Bild 6.3 dargestellt. Es ist ersichtlich, dass für hohe Momente die Konvergenz gegen das Gleichgewicht bei Quadraten sehr viel langsamer stattfindet, als bei Rechtecken. D.h., Rechtecke führen sehr viel schneller zu einer Ausbreitung.

Abbildung 6.2: H-Funktion und $\|J\|_1$.Abbildung 6.3: M_4 und M_{10}

6.2 Quadratisches Stoß-Modell vs. Freier Fluss

Wir werden durch folgende Experimente den Ruhezustand der Lösung der Boltzmann Gleichung einmal ohne Stoßoperator (freier Fluss: $Kn \rightarrow \infty$) und einmal mit quadratischem Stoßoperator (wobei $Kn = 1.0$) vergleichen. Im folgenden Beispiel ist der Geschwindigkeitsraum

$$G = \{-10, \dots, 0, \dots, 10\}^3$$

und $\alpha = 2$ (d. h. $\Delta v = 2\sqrt{2T}/10$).

6.2.1 Gas im Quadrat

Hier betrachten wir Gas in einem Quadrat, dessen vier Seiten sich in tangentialer Richtung mit einer festen absoluten Geschwindigkeit $u = \Delta v$ bewegen (mit diffusen Randbedingungen $T = 273$). Wir berechnen die numerische Lösung der Boltzmann-Gleichung in zwei Fällen, einmal mit und einmal ohne Stoßterm. In Abbildung 6.4 wird gezeigt, dass sich die Gasteilchen um das Zentrum des Quadrats drehen.

Im Fall des freien Flusses (ohne Stoßterm) sind die Gasgeschwindigkeitsbeträge fast

gleich im gesamten Gebiet und die Gasteilchen bewegen sich im quadratischen Wirbel (siehe Bild 6.4(A)). Im zweiten Fall, mit dem Stoßterm (mit allen Quadraten) und mit der Knudsen-Zahl $Kn = 0.01$, sinken die Geschwindigkeitsbeträge von den Seiten in Richtung des Zentrums, so dass sich ruhige Stellen im Zentrum des Gebiets befinden. Außerdem sind die Wirbel in der Nähe des Zentrums fast Kreise (siehe Bild 6.4(B)).

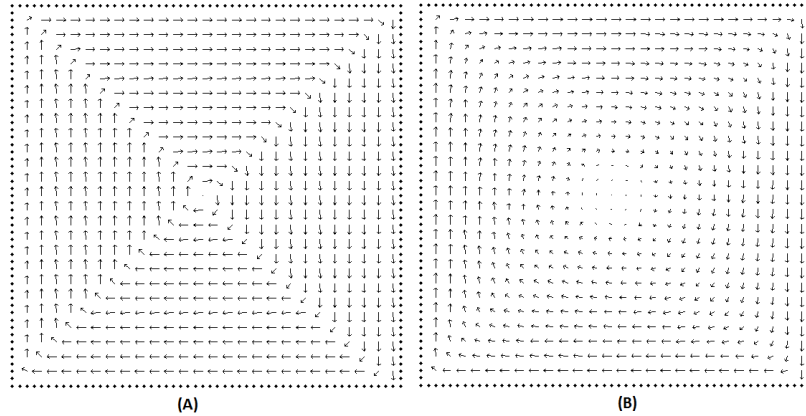


Abbildung 6.4: Geschwindigkeitsprofil: (A) Freier Fluss (B) mit einem quadratischen Stoßterm

6.3 Quantitative Ergebnisse

Wie gut sind unsere entwickelten Modelle? Um diese Frage zu beantworten, vergleichen wir physikalische Größen unserer Ergebnisse mit anderen Methoden z. B. DSMC. Als Standard Experiment wollen wir den Wärmefluss zwischen zwei Platten betrachten.

6.3.1 Wärmefluss zwischen zwei Platten (Quadratische und rechteckige Stoßmodelle vs. DSMC)

Problemdarstellung: Dieses Problem ist ein eindimensionales Problem. Es betrachtet den Wärme-Transport durch ein Gas zwischen zwei parallelen, bewegungslosen Platten unterschiedlicher Temperatur haben.

D. J. RADER, M. A. GALLIS, J. R. TORCZYNSKI, UND W. WAGNER in [63] haben Gas mit dem Druck $p_{init} = 266.644 Pa$ und der Temperatur $T_{init} = 273.15 K$ zwischen zwei Wänden betrachtet. Ein Rand hat die Temperatur $T_{R_0} = 323.15 K$ und der zweite besitzt die Temperatur $T_{R_1} = 223.15 K$. Der Abstand zwischen den Rändern ist 1 mm und die Knudsenzahl $Kn = 0.024$. Sie haben den stationären Fall durch *DSMC* berechnet und die Momente in der Mitte des Kanals betrachtet. Sie ermittelten in der Mitte eine Temperatur von $T_m = 274.58 K$ und einen Druck von $p_m = 264.96 Pa$.

In unseren Simulationen zerlegen wir den Abstand zwischen den Rändern in N_x Zellen, wählen die Maximum-Geschwindigkeit als $\alpha\sqrt{2T_{init}}$, und die Größe des Geschwindigkeitsraums ist N^3 (dreidimensional). Als Temperaturprofil bekommen wir fast eine Gerade insbesondere in der Mitte des Kanals. Diese Gerade werden wir Mittellinie nennen.

In folgenden Experimenten betrachten wir folgende Momente: T_0, T_1 sind Temperaturen in der Randnähe. $\Delta T_0, \Delta T_1$ sind die Abstände zwischen dem Temperaturprofil und der Mittellinie zum Rand.

Exp. 01 -Variation von N_x

Hier werden wir die Simulationen für verschiedene Werte von N_x durchführen und die betrachteten Werte in einer Tabelle darstellen. Für alle Experimente gilt das Geschwindigkeitsmodell 16^3 , $\alpha = 2.0$, und die Stoßmenge ist die Quadraten-Menge.

Das Bild 6.5 zeigt Temperaturprofile für verschiedene N_x . Es sind kaum deutliche Änderungen für $N_x \geq 100$ festzustellen (siehe Tabelle 6.1). Siehe die folgende Tabelle. Aus der Tabelle 6.1 kann man sehen, dass die Momente gegen eine feste Größe konvergieren, und die Änderungen zwischen $N_x = 150$ bis 200 kleiner sind als 0.05%.

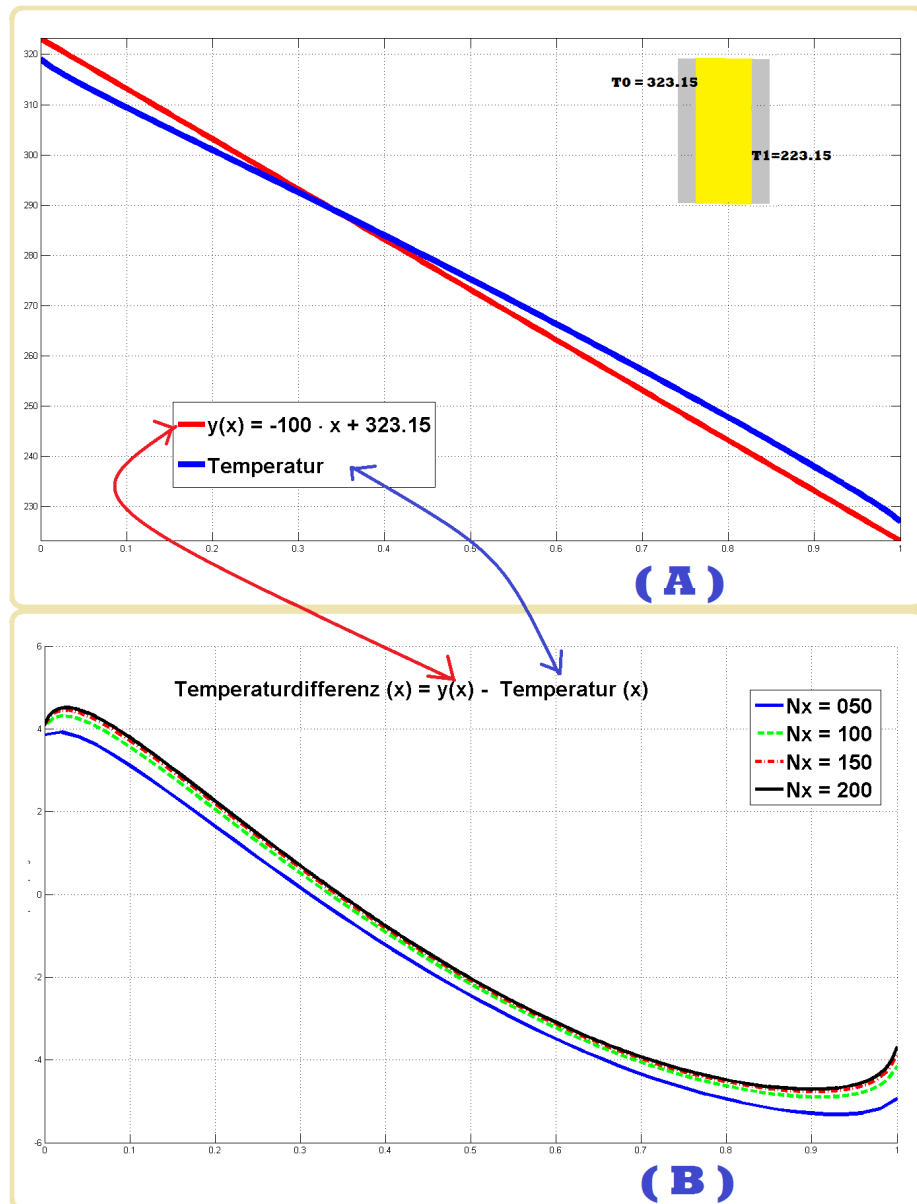


Abbildung 6.5: (A)-Temperaturverlauf zwischen parallelen Platten für: ($N_x = 150$), *Modell* – 16^3 . (B)-Temperaturdifferenz bezüglich N_x

$\begin{array}{c} \diagdown \\ \text{Momente} \end{array} \quad N_x$	50	100	150	200	DSMC
T_0	317.296	318.082	318.386	318.554	≈ 319 K
T_1	228.083	227.306	227.001	226.831	≈ 227 K
$\text{Sprungtemperatur}_0$	5.8543	5.0682	4.7639	4.5956	≈ 4 K
$\text{Sprungtemperatur}_1$	4.9330	4.1561	3.8510	3.6807	≈ 4 K
T_m	275.4854	275.260	275.1905	275.156	273.15 K
p_m	264.6739	264.947	265.0458	265.096	264.9 Pa
Heat flux	1295	1430	1475	1499	≈ 1511 Watt/m ²

Tabelle 6.1: Exp. 01 -Variation von N_x .

Außerdem liegen die Größen nah an den Ergebnissen von DSMC.

Exp. 02 -Variation von N (Variation der Geschwindigkeitsraumgröße)

In diesem Beispiel werden wir mit der Größe des Geschwindigkeitsmodelles spielen. $N_x = 150$, $\alpha = 2$: Die Stoßmenge ist die Quadraten-Menge.

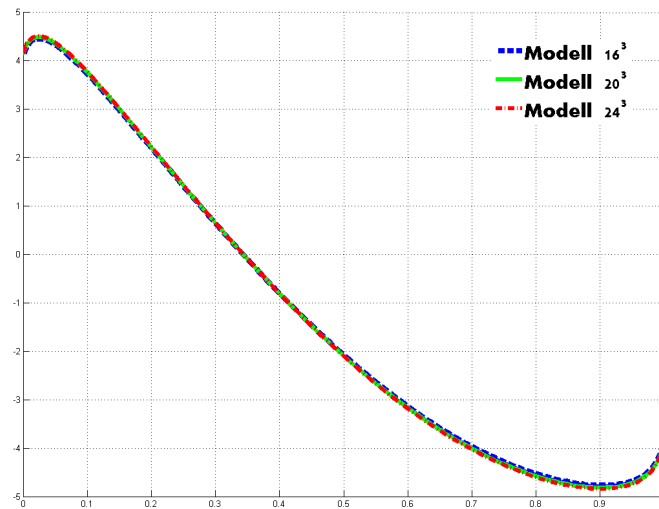


Abbildung 6.6: Temperaturverlauf zwischen parallelen Platten

Geschwindigkeitsanzahl ist $(2K)^3$. Wir werden hier für verschiedene Geschwindigkeitsmodelle 16^3 –, 20^3 – und 24^3 –*Modell* Simulationen durchführen. Aus Tabelle 6.2 kann man gleich erkennen, um so näher die Lösung an der DSMC-Lösung ist, desto größer ist das Modell. Die Profile sind im Bild 6.6 zu sehen. Diese Tabelle zeigt, dass die Abweichung zwischen dem Modell 20^3 und 24^3 kaum zu sehen ist und sehr nah an

Model \ Momente	16^3	20^3	24^3	DSMC
T_0	318.386	318.346	318.325	≈ 319 K.
T_1	227.001	227.037	227.057	≈ 327 K.
ΔT_0	4.7639	4.8039	4.8251	≈ 4 K.
ΔT_1	3.8510	3.8870	3.9068	≈ 4 K.
T_m	275.1905	275.2093	275.2180	≈ 273.15 K.
p_m	265.0458	265.0638	265.0725	≈ 264.9 Pa.
Heat flux	1475	1492	1501	≈ 1511 Watt/m ² .

Tabelle 6.2: Exp. 02 -Variation von N

den DSMC-Ergebnissen liegt.

Exp. 03 - Variation von L (die Größe des größten Quadrats)

Hier werden wir untersuchen, wie groß der Einfluss der Anzahl der Stöße ist. Im Folgenden werden wir im Geschwindigkeitsraum (20^3) verschiedene Modelle (M_L) untersuchen. Wobei die Quadratgrößen – für das Modell M_L – kleiner als L sind. Außerdem betrachten wir hier auch das Rechteckmodell. Unsere Daten sind: $N_x = 150$, $\alpha = 2$.

Das Bild 6.7 zeigt, dass der Temperaturverlauf, wenn $L \in \{15, 20\}$, fast identisch ist

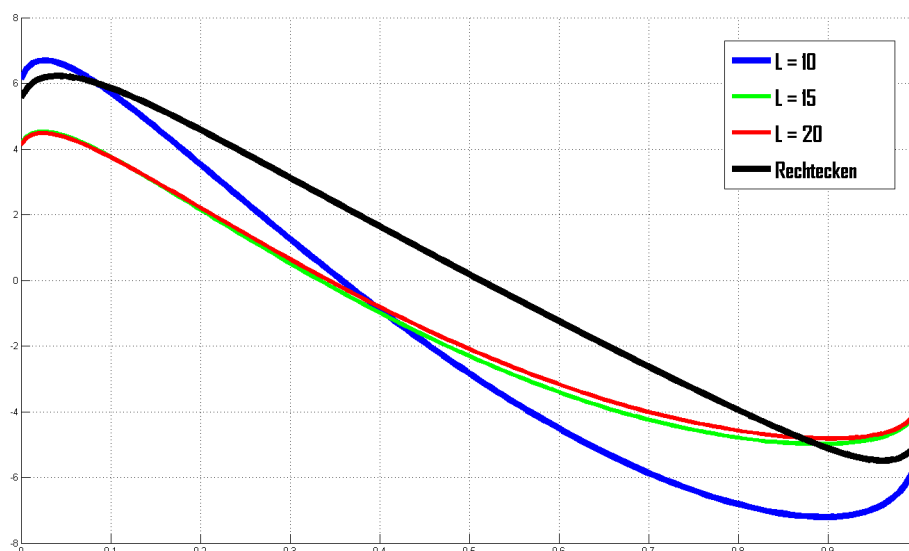


Abbildung 6.7: Temperaturverlauf zwischen parallelen Platten

$\begin{array}{c} \text{Momente} \\ \backslash \\ L \end{array}$	20	15	10	Rechtecke	DSMC
T_0	318.346	318.305	316.342	316.913	≈ 319 K
T_1	227.037	227.078	228.531	228.014	≈ 327 K
ΔT_0	4.8039	4.8448	6.8079	6.2369	≈ 4 K
ΔT_1	3.8870	3.9281	5.3813	4.8642	≈ 4 K
T_m	275.2093	275.4248	275.9337	272.9256	≈ 273.15 K
p_m	265.0638	265.2115	265.7874	263.7174	≈ 264.9 Pa
Heat flux	1492	1499	2159.66	1598.85	≈ 1511 Watt/m ²

Tabelle 6.3: Exp. 02 -Variation von L

und nah von einer Geraden liegt. Aber man kann schnell erkennen, dass das Temperaturprofil eine deutliche Gerade ist, im Fall, dass die Stoßmenge alle Rechtecke enthält. Außerdem zeigt das Bild 6.7, dass die Rechteck-Modelle ein besseres Profil liefern, da die Kurve in der Mitte des Kanals eine Gerade ist.

Exp. 04 - Änderung der Temperaturskala α

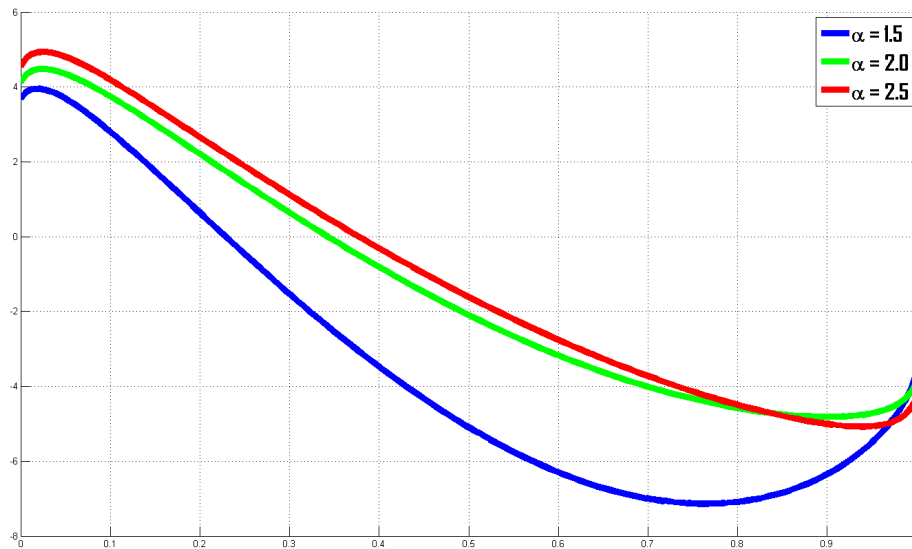


Abbildung 6.8: Temperaturverlauf zwischen parallelen Platten

Modell 20³, $N_x = 150$: Die Stoßmenge ist die Quadraten-Menge (siehe Bild 6.8)

α Momente	1.50	2.00	2.70
T_0	318.788	318.346	317.926
T_1	226.783	227.037	227.441
ΔT_0	4.3616	4.8039	5.2236
ΔT_1	3.6331	3.8870	4.2911
T_m	278.1993	275.2093	274.7248
p_m	267.0791	265.0638	264.8224
Heat flux	1275	1492	1631.26

Tabelle 6.4: Exp. 03 -Variation von α **Zusammenfassung:**

1. Für $Nx > 150$ ändert sich die Gleichgewichtslage des Problems kaum.
2. Die Modelle, die größer gleich 16^3 sind, haben fast die Gleichgewichtslösung.
3. Die quadratischen Modelle liefern keine sauberen Geraden in der Mitte des Kanals, (was wir in der Strömungsdynamik erwarten werden), sondern eine Gerade mit Krümmung. Mit Rechtecken kann man eine erwartungsgemäße Lösung im Inneren erreichen (siehe Abb.6.7). D.h., dass die Rechteckmodelle für dieses Testproblem ein besseres qualitatives Verhalten reproduzieren können.

6.4 Qualitative Ergebnisse

Hier werden wir keine physikalischen Größen vergleichen, sondern nur qualitative Lösungsverhalten untersuchen. Der Geschwindigkeitsraum in folgenden Experimenten ist:

$$G = \{-10, \dots, 0, \dots, 10\}^3.$$

6.4.1 Das Shocktubeproblem.

Man betrachte zwei Hälften eines unendlichen Kanals, der in der Mitte durch eine Membran getrennt ist. Auf der linken Seite befindet sich ein Hochdruck-Gas und auf der rechten Seite Gas mit niedrigem Druck. Beim Entfernen der Membran wird das Gas von links nach rechts expandieren. Dieses Problem ist ein standardisiertes Beispiel für die Euler-Gleichung in der Theorie der hyperbolischen PDE's (siehe [38]). Das Dichte-Profil besteht aus vier konstanten Plateaus, die durch eine glatt verlaufende Verdünnungszone auf der linken Seite eine Kontakt-Diskontinuität in der Mitte und eine andere Diskontinuität, der Stoßfront, auf der rechten Seite voneinander getrennt sind. Das Geschwindigkeitsprofil ist Null auf der linken, sowie auf der rechten Seite, und ist eine positive Konstante in der Mitte. Unsere Simulation mit quadratischen Stoßoperator liefert die Bilder 6.9. Wir erkennen deutlich die Plateaus im Dichte-Profil.

In unserem Beispiel haben wir $Kn = 0.5$, $T_{left} = T_{right} = 0.5$, $\rho_{left} = 2 \cdot \rho_{right} = 1$ und die Quadraten a Stoßmenge gewählt. Ein interessanter Effekt kann in der Mitte der Geschwindigkeitsfunktion gesehen werden, wo wir eine leichte Abweichung von dem konstanten Profil erkennen. Es war genau diese Störung, die entdeckt und identifiziert wurde in [50] als RGD-Korrektur auf die Euler-Gleichung. Das zeigt, dass sich das richtige makroskopische Verhalten ergibt, genau wie es bei der Euler-Gleichung erwartet wird. Daraus folgt, dass das der makroskopische Lösung des Euler-Gleichungsverhalten entspricht.

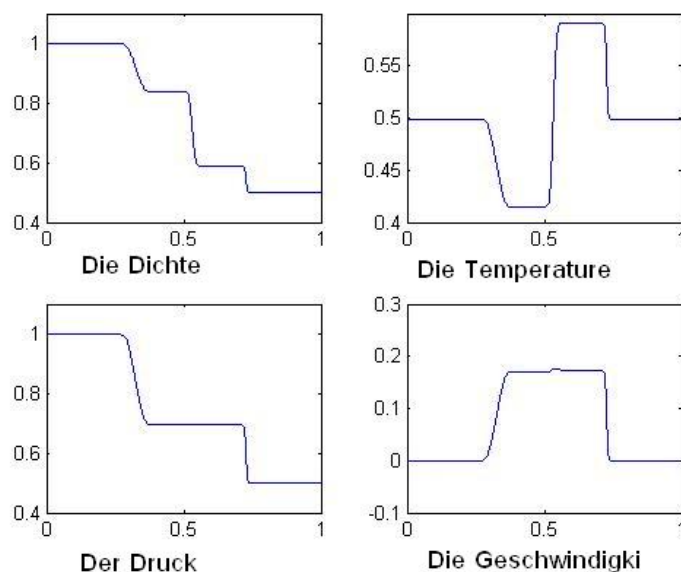


Abbildung 6.9: Das Shocktubeproblem

6.4.2 Thermische Kriechströmung

Ein Gradient der Wandtemperatur erzeugt im Fall dünner Gas einen Fluss in Richtung des Gradienten. Dieser Effekt wird in der kinetischen Gastheorie thermische Kriechströmung "Thermal creep flow" genannt. Dieses Phänomen ist seit langer Zeit bekannt (z.B. J. C. Maxwell [40], M. Knudsen [37] und E. Kennard [36]). Es wurde insbesondere in den letzten 20 Jahren bei Ingenieurs-Anwendungen der Strömung untersucht und angewendet. Zum Beispiel (Huber [39], Hudson & Bartel [11], Sugimoto & Sone [57], Sone [59], ect).

Hier führen wir zwei Experimente durch. Im ersten Experiment betrachten wir die Beziehung zwischen dem Masse-Fluss und der Knudsenzahl. Beim zweiten Experiment versuchen wir, einen Einwegfluss im Kanal zu erzeugen, und führen weitere Untersuchungen dazu durch. Mit den beiden Experimenten zeigen wir, wie einfach es mit unserem Programm (im Kapitel 5) ist, die Randbedingungen zu charakterisieren.

1-Thermische Kriechströmung im ebenen Kanal

Wir betrachten einen unendlichen periodischen Kanal, der aus identischen Abschnitten besteht. Einer von diesen Abschnitten ist in Abb. 6.10 gezeigt und wie folgt festgelegt: Sein linker und sein rechter Rand sind periodisch, und der untere Rand ist elastisch. Der obere Rand hat eine diffuse Randbedingung mit Temperaturgradienten, so dass die Temperatur von der linken Seite bis zur Mitte des Abschnittes linear von T_2 auf

T_1 sinkt und von der Mitte bis zu rechten Seite des Abschnitts linear von T_1 auf T_2 steigt, wobei $T_2/T_1 = 3$ ist. Wir betrachten im Kanal Gas mit einer Knudsenzahl $Kn = 0.5$, wobei $Kn = \frac{\text{Die mittlere freie Weglänge}}{\text{Kanalbreite}}$ ist. Danach entstehen wegen der thermischen Kriechströmung zwei Wirbel, die sich in Richtung des Temperatur-Gradienten drehen (siehe Bild 6.10).

Parameter der Experimente:

Ort-Diskretisierung ist 50×200 , $dx = dy$, $\text{Kanalbreite} = 1 \text{ mm}$,

$\text{Maximum} - \text{Geschwindigkeit} = 1.5\sqrt{2T_2}$.

Der Geschwindigkeitsraum besteht aus $G = \{-9, \dots, 9\}^3 \cdot dv$, wobei $dv = \frac{1.5\sqrt{2T_2}}{9}$, und die Stoßmenge die Menge aller Quadrate ist.

$T_1 = 1.0$, $T_2 = 3.0$ ist und die Anfangstemperatur des Gases ist $T_0 = 2.0$.

Hier werden wir die Beziehung zwischen der Knudsenzahl und der Stärke des Wirbels

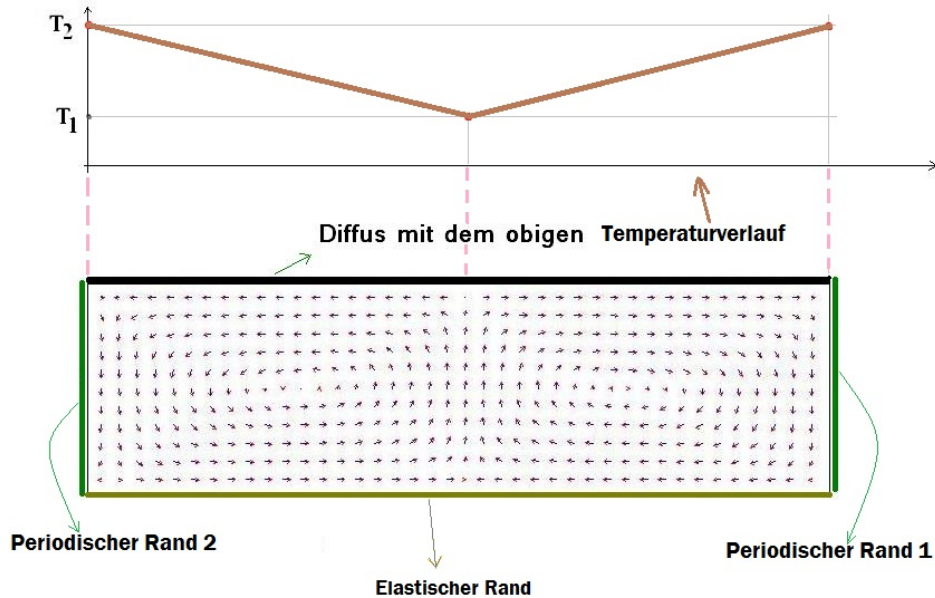


Abbildung 6.10: Fluss durch Temperatur Gradienten

untersuchen. Dafür definieren wir den Massefluss $MF(i)$ für die beiden Richtungen der x -Achse an der Schnittstelle i folgendermaßen:

$$MF(i) = \sum_{k=1}^{50} |\bar{v}_x(i, k)| \cdot \rho(i, k).$$

Abbildung 6.11 zeigt die Änderung von $MF = \max\{MF(i) : i = 1, \dots, 200\}$ bezüglich der Knudsenzahl Kn . Man kann deutlich sehen, dass MF ein globales Maximum hat, und es liegt bei $Kn = 0.25$. Ähnliche Effekte finden wir bei Sone [59] (Seite 263), wäh-

rend er den Massefluss durch einen Kanal mit Einbuchtungen mit DSMC-Simulation untersucht. Man kann dazu auch feststellen, dass, wenn $Kn \ll 1$ ist, wandert das Ruhegebiet näher zum Rand der einen linearen Temperaturverlauf hat.

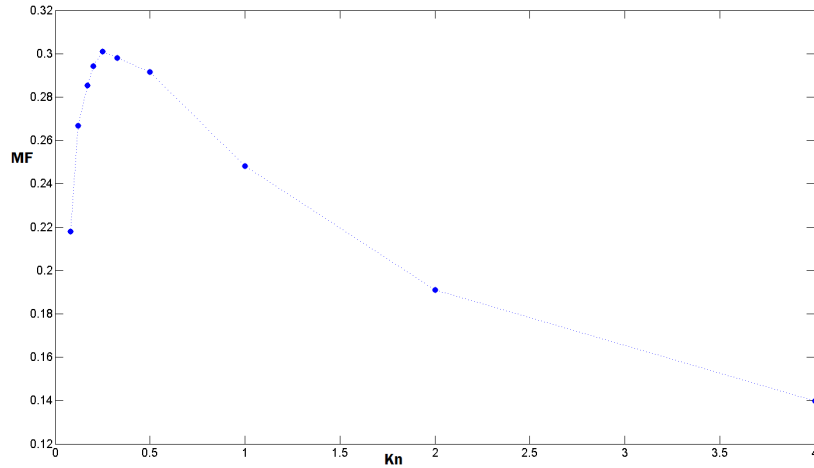


Abbildung 6.11: Massefluss und Knudsenzahl

2-Thermische Kriechströmung im Kanal mit Einbuchtungen

Einen gerichteten Fluss in einem ebenen Kanal mit einem einheitlichen Querschnitt durch die Entwicklung der Temperaturverteilung zu erzeugen, ist nicht möglich. Dies wird mathematisch durch Golse gezeigt (siehe seinen Beweis in [58] Anhang A.4).

Ziel ist eine Anordnung zu finden, mit der ein gerichteter Fluss erzeugt werden kann. Der Unterschied zum vorherigen Beispiel ist, dass wir Einbuchtungen im Kanal haben und entlang dieser die Temperatur-Gradienten. Bild 6.12 zeigt die Geometrie des Kanals und die Temperaturverteilung seiner Ränder, wobei $T_1/T_0 = 3$ ist.

Betrachten wir jetzt den Kanal mit Gas $Kn = 0.5$. Wirbel in den Einbuchtungen fangen an sich in Richtung der Temperatur-Gradienten zu drehen. Dadurch bewegt sich das Gas in der Mitte des Kanals in eine Richtung. Dieses Beispiel ist bei Sone [59] (Seite 261) dargestellt. Das daraus resultierende Geschwindigkeitsprofil zeigt Bild 6.13. Im Folgenden untersuchen wir, wie der Massenfluss von der Knudsenzahl Kn abhängt. Durch folgende Experimente zeigen wir, dass der Massefluss dasselbe Verhalten hat wie in Abb. 6.11 des letzten Experiments und auch wie bei Sone [59]. (siehe Abb. 6.14).

Parameter der Experimente:

$$b = d = D, L = 3D.$$

Die Ort-Diskretisierung ist 100×150 , $dx = dy$, Kanalbreite : $D = 1 \text{ mm}$,

$$\text{Maximum - Geschwindigkeit} = 1.5\sqrt{2T_2}.$$

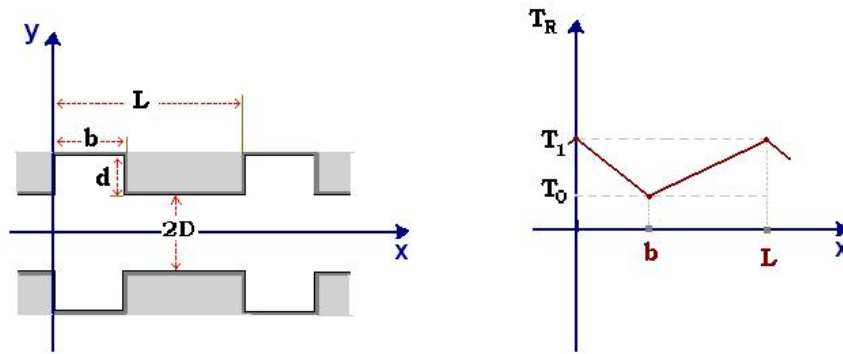


Abbildung 6.12: RandTemperatureVerteilung

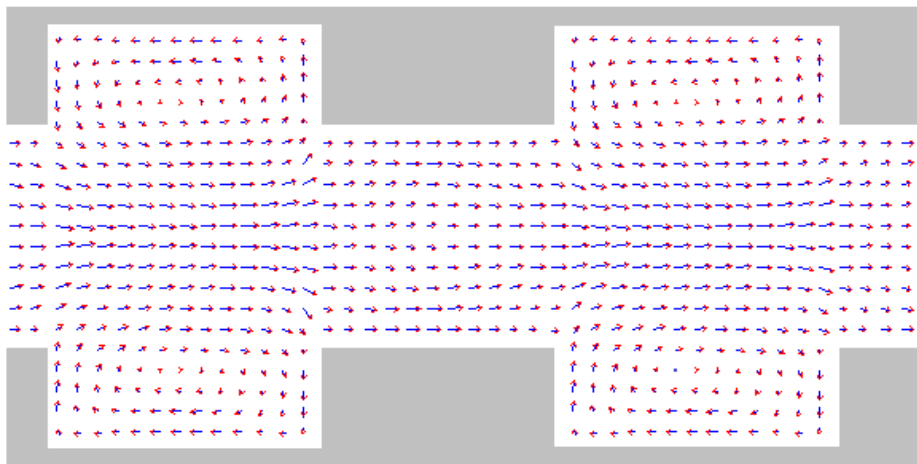


Abbildung 6.13: Knudsen-Pumpe

Der Geschwindigkeitsraum besteht aus $G = \{-9, \dots, 9\}^3 \cdot dv$, wobei $dv = \frac{1.5\sqrt{2T_2}}{9}$, und die Stoßmenge ist die Menge aller Quadrate.

$T_1 = 1.0$, $T_2 = 3.0$, und die Anfangstemperatur des Gases ist $T_0 = 2.0$.

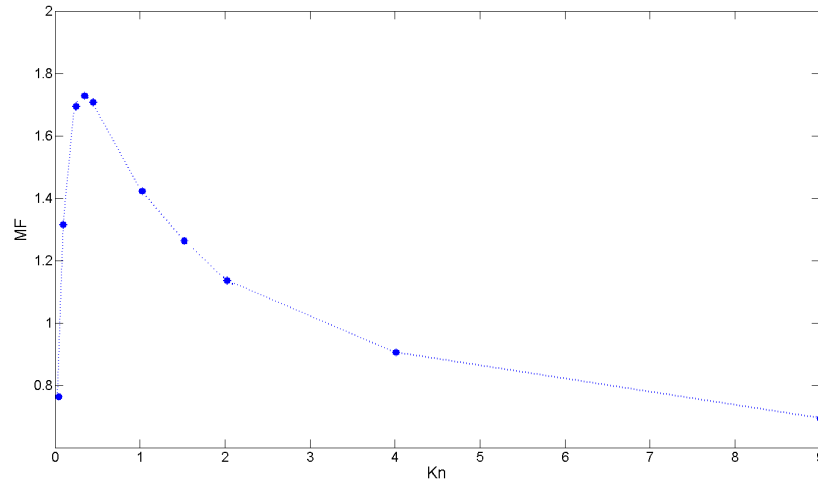


Abbildung 6.14: Massefluss durch einen Kanal mit Einbuchtungen

6.4.3 Schockfront in einem Kanal

In diesem Beispiel haben wir in einem Gas-Kanal (Räumlich 2-Dim.) die Schockfront, die durch ein Hindernis in dem Kanal erzeugt wird, beobachtet. Diese erzeugten Schockfronten werden weit von den Hindernisse reflektiert und dann verschwinden sie langsam aus dem Bild.

Der Geschwindigkeitsraum ist

$$G = \{-10, \dots, 0, \dots, 10\}^3$$

und $\Delta V = \sqrt{2T}/10$.

Schockfront im Kanal (Zylinder)

In folgendem Experiment, das in einem Kanal stattfindet, gibt es einen Zylinder der zwischen zwei Gaszonen mit unterschiedlichen Druckverhältnissen liegt. Der unterschiedliche Druck erzeugt eine Gasströmung vom Hochdruck- zum Niederdruckbereich. Diese Strömung wird durch den Zylinder im Kanal gestört. Daraus ergeben sich unterschiedliche Druck- und Masse-Verteilung im Kanal. Die Bilder entsprechen den Ergebnissen

von Hänel [31] (Seite 211), der die L-BGK-Methoden benutzt hat und entsprechen auch den Ergebnissen der DSMC-Methode (Cercignani [22]).

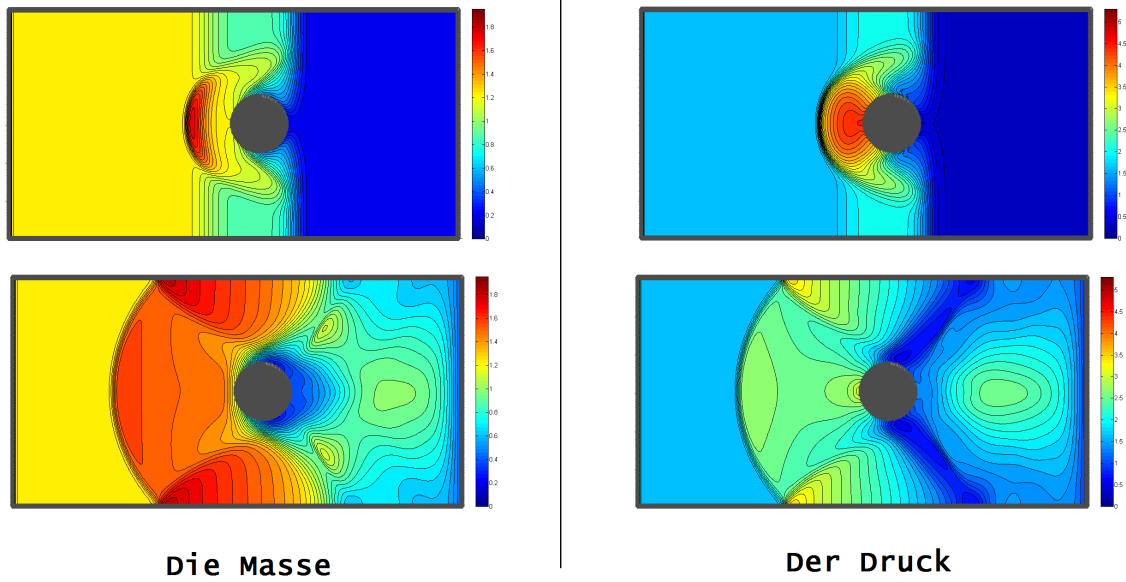


Abbildung 6.15: Der Fluss um einen Zylinder in einem Kanal

Schockfront im Kanal (Dreiecke)

In diesem Beispiel wollen wir eine Schockfront in dem Kanal beobachten, in dem sie auf ein Hindernis (Dreieck) trifft. Von der fluiddynamischen Theorie erwarten wir, dass ein Teil der Stoßfront das Hindernis überquert, und ein Teil davon reflektiert wird. Die numerische Simulation zeigt viel mehr Details, z.B. wird eine Druckspitze aus dem Dreieck ist, welches die Stoßfront verursacht, reflektiert (siehe Abb. 6.16)

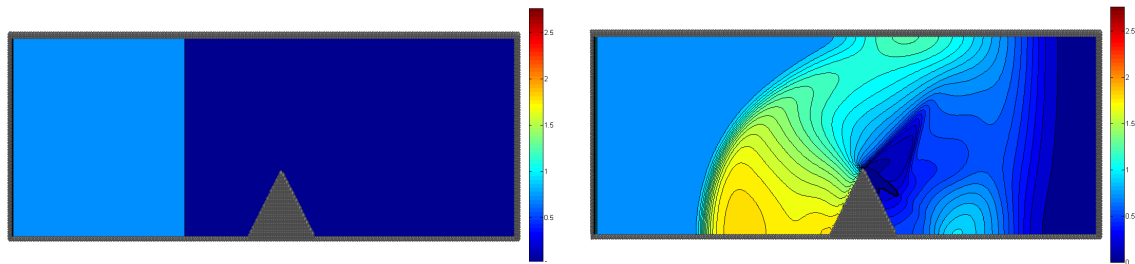


Abbildung 6.16: Shock Front im Kanal

Bei der Wahl geeigneter Randbedingungen auf der rechten Seite (hier: teilweise reflektierenden Zustand), kann man Wirbelstrukturen des Strömungsfeldes im Zuge des Hindernisses produzieren (siehe Abb. 6.17)

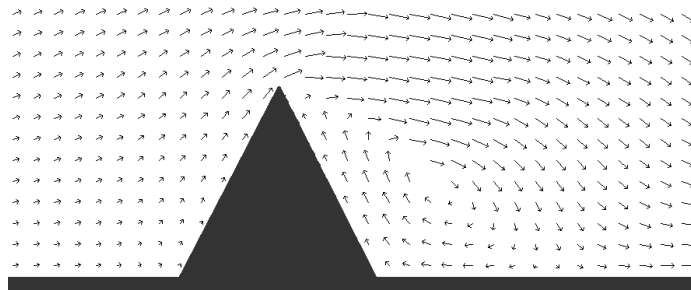


Abbildung 6.17: Wirbel im Schockfront im Kanal mit Dreieckhindernis

Schockfront im Kanal (H)

Im Folgenden betrachten wir die Shockfront im Kanal, in dem es ein Objekt in H-Form in der Mitte gibt. Im Bild 6.18 erkennt man den Druck im Kanal, und in Bild 6.19 kann man die Geschwindigkeitsprofile sehen.

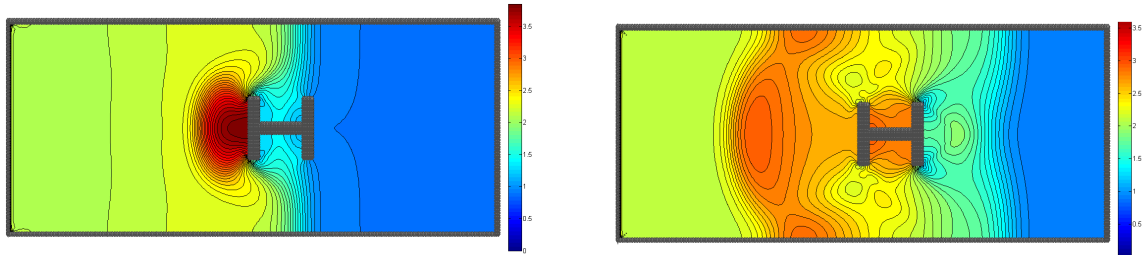


Abbildung 6.18: Druck am H-Hindernis

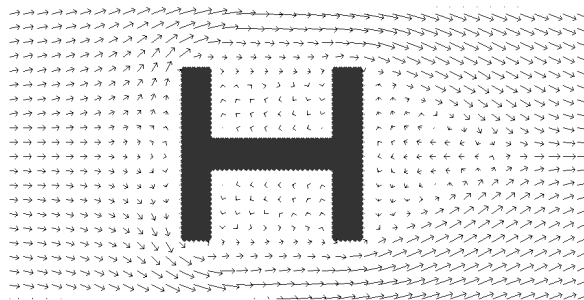


Abbildung 6.19: Geschwindigkeit am H-Hindernis

Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir die Grundlagen für DVM zusammengetragen. Dann haben wir für Gase mit kleiner Knudsen-Zahl in den allgemeinen Fällen (unabhängig vom Grad des Geschwindigkeitsraums) die Konvergenz zu der Maxwell-Verteilung bewiesen. Weiterhin haben wir grundsätzlich eine Detailansicht über die Linearisierung des Stoßoperators und die Eigenschaften der linearisierten Matrix gefunden.

Weiterhin haben wir eine Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums ($\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^3$) definiert und einige DVMs untersucht.

Zuerst haben wir mit \mathbb{R}^2 gearbeitet, das Gitter G_n , $n > 1$ definiert und jedes Rechteck, das Eckpunkte aus G_n besitzt, mit einem Vektor aus $\{-1, 0, +1\}^{n^2}$ durch eine Funktion g verbunden. Dann haben wir nach einer Rechteckbasis gesucht und bewiesen, dass für jedes Stoß-Modell, das eine Rechteckbasis beinhaltet, die Stoß-Invarianten $\text{span}\{1, v_x, v_y, v^2\}$ lauten. Darauf folgt die Definition des Komplet-Stoßmodells (vollständige Stoßmenge), dessen Grad $n^2 - 4$, und des Nichtkomplet-Stoßmodells, deren Grad kleiner als $n^2 - 4$ ist. Die Lösung der homogenen Boltzmann-Gleichung konvergiert für die beide Stoß-Modelle zu einer Gleichgewichtsstelle. Die Gleichgewichtsfunktion für Komplet-Stoßmodell ist die Maxwell-Verteilung, für die Nichtkomplet-Stoßmodelle gilt diese nicht, was schon für beide Fälle bewiesen wurde. Außerdem haben wir einige Nichtkomplet-Stoßmodelle untersucht und ihre Gleichgewichtsstelle bestimmt. Darüber hinaus haben wir einen Algorithmus entworfen, der alle Quadrate in G_n finden kann, und eine Theorie für die Anzahl der Quadrate und für die der Rechtecke aufgestellt.

Wir haben eine ähnliche Theorie für \mathbb{R}^3 verfasst, diese für die Menge der Rechtecke, deren Ebene parallel zu einer Achsenebene ist, als Komplet-Stoßmodelle betrachtet. Die Algorithmen, um alle Rechtecke und alle Quadrate zu bestimmen, haben wir außerdem in diesem Teil dargestellt.

Danach haben wir die Lösung des Transportteiles der Boltzmann-Gleichung, insbesondere im 2 – dim.Ortsraum, untersucht. Wir haben die Algorithmen dargestellt, um beliebige Anfangswerte und Randbedingungen zu verwenden. Dann haben wir weiterhin Methoden beschrieben, mit denen die makroskopischen Größen des Modelles berechnet werden können.

Schließlich haben wir numerische Experimente für die Boltzmann-Gleichung durchgeführt, die vom Quadrat-Stoßoperator abhängt. Die Ergebnisse wurden mit denen der physikalischen Experimente oder mit den Ergebnissen der anderen numerische Methoden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung verglichen.

Literaturverzeichnis

- [1] L. S. Andallah. On the generation of a hexagonal collision model for the boltzmann equation. *accepted for publication in Comp. Meth. in Appl. Mathematics*, 4(3):267–285, 2004.
- [2] L. S. Andallah and H. Babovsky. A discrete boltzmann equation based on hexagons. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 13(11):1–28, 2003.
- [3] T. Ohwada Y. Sone K. Aoki. Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall an the basis of the linearized boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids*, A 1:363 – 370, 1989.
- [4] H. Babovsky. *Die Boltzmann-Gleichung: Modellbildung-Numerik-Anwendungen*. B.G. Teubner, Stuttgart . Leipzig 1998.
- [5] H. Babovsky. On a simulation scheme for the boltzmann equation. *Math. Methods Appl. Sci.*, 8(19):223–233, 1986.
- [6] H. Babovsky. A convergence proof for nabus boltzmann simulation scheme. *Eur. J. Mech., B/Fluids.*, 8:41 – 55, 1989.
- [7] H. Babovsky. Time average of simulation schemes as approximations to stationary kinetic equations. *Eur. J. Mech., B/Fluids*, 11:199 –212, 1992.
- [8] H. Babovsky. A constructive approach to steady nonlinear kinetic equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 89:199 – 211, 1998.
- [9] H. Babovsky. Hexagonal kinetic models and the numerical simulation of kinetic boundary layers. *Preprint M 12/03, Inst. f. Mathematik, TU Ilmenau*, 2003.
- [10] H. Babovsky. Discrete kinetic models in the fluid dynamic limit. *Computers and mathematics with applications. A - Amsterdam [u.a.] : Elsevier Science*, 2:256 – 271, 2014.

- [11] M.L. Hudson T. J. Bartel. Dsmc simulation of thermal transpiration and accommodation pumps. *Rarefied Gas Dynamics(CEPADUES)*, 1:719–726.
- [12] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the direct simulation of gas flows*. Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [13] A. Bobylev. On approximation of the boltzmann equation by discrete. *C. R. Acad. Sci. Pariss*, 320(5):639 – 644, 1995.
- [14] A. Palczewski J. Schneider A. Bobylev. A consistency result for a discrete-velocity model of the boltzmann equation. *SIAM J. Numer. Anal. vol.tzman*, 34(5):1865 – 1883, 1997.
- [15] C. S. Kim J. W. Dufty A. Santos J. J. Brey. Analysis of nonlinear transport in couette flow. *Phys Rev A Gen Phys*, 40(12):7165–7174, 1989.
- [16] J. Broadwell. Shock structure in a simple discrete velocity gas. *Phys. of Fluids*, 7:1243 – 1247, 1964.
- [17] J. Broadwell. Study of a rarefied shear flow by discrete velocity method. *Journal of Fluid Mechanics*, 19(03):401 – 414, 1964.
- [18] C. Buet. A discrete-velocity scheme for the boltzmann operator of rarefied gas dynamics. *Transport Theory and Statistical Physics*, 25(1):33–60, Jan. 1996.
- [19] R. E. Caflisch B. Nicolaenko C. Bardos. The milne and kremers problem for the boltzmann equation of a hard sphere gas. *Comm. pure Appl. Math.*, 39:323–352, 1986.
- [20] T. Carleman. Problèmes mathématiques dans la théorie cinétique des gaz. *Sci. Inst. Mittag-Leffler. 2. Almqvist & Wiksells Boktryckeri Ab Uppsala*, 2:–, 1957.
- [21] A. Bobylev C. Cercignani. Discrete velocity models without nonphysical invariants. *J. Statist. Phys.*, 97 Issue 3:677?–686, 1999.
- [22] C. Cercignani. *Rarefied Gas Dynamics: From Basic Concepts to Actual Calculations*. Cambridge University Press, 2000.
- [23] A. J. Chorin. Numerical solution of boltzmanns equation. *Comm. pure Appl. Math.*, 25:171 – 186, 1972.
- [24] V. Garzó M. López de Haro. Nonlinear transport for a dilute gas in steady couette flow. *Phys. Fluids*, 9(3):776–776, 1997.

-
- [25] B.D. Shizgal E.d. Weaver eds. *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations*. Washington, 1994.
- [26] L. Fainsilber, P. Kurlberg, and B.Wennberg. Lattice points in circles and discrete velocity models for the boltzmann equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 37:1903–?1922,, 2006.
- [27] L. Fainsilber, P. Kurlberg, and B.Wennberg. The boltzmann equation on a two-dimensional lattice; theoretical and numerical results. *Bulletin of the Institute of Mathematics Academia Sinica (New Series)*, 2(2):667–685, 2007.
- [28] R. Gatignol. *Théorie Cinétique des Gaz á Répartition Discrète de Vitesses*. Springer Lecture Notes in Physics, 1975.
- [29] J. C. Hang and J. Y. Yang. Rarefied flow using nonlinear model boltzmann equations. *J. Comput. Phys*, 120:323 – 339, 1995.
- [30] V. A. Panferov A. G. Heintz. A new consistent discret-velocity model for the boltzmann equation. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences.*, 25(7):571–593, 2002.
- [31] D. Hänel. *Molekulare Gasdynamik: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden*. Springer-Verlag Berlin und Heidelberg, 2004.
- [32] L. Arkeryd C. Cercignani R. Illner. Measure solutions of the steady boltzmann equation in a slab. *Common Math. Phys.*, 142:285–296, 1991.
- [33] R. Illner and H. Neunzert. On simulation methods for the boltzmann equation. *Transport. Theory Statist. Phys.*, 16 issue 2:141–154, 1987.
- [34] T. Platkowski R. Illner. Discrete velocity models of the boltzmann equation: A survey on the mathematical aspects of the theory. *SIAM Review*, 30(2):213 – 255, June 1988.
- [35] G. A. Jones J. M. Jones. *Elementary Number Theory*. Springer Science and Business Media, 1998.
- [36] E. Kennard. *Kinetic theory of gases*. McGraw-Hill New York, 1938.
- [37] M. Knudsen. Eine revision der gleichgewichtsbedingung der gase. thermische molekularströmung. *Annalen der Physik (Leipzig)*, 31:205–229, 1910.

-
- [38] R.J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1992.
 - [39] CA. Huber TE. Huber M. Sadoqi JA. Lubin. Nanowire array composites. *science*, (263):800–802, 1994.
 - [40] J. C. Maxwell. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170:231 – 256, 1879.
 - [41] L. Desvillettes S. Mischler. About the splitting algorithm for boltzmann and bgk equations. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 6:1079–1101, 1996.
 - [42] K. Nanbu. Direct simulation scheme derived from the boltzmann equation. i. monocomponent gases. *J. Phys. Soc. Jpn*, 49:2042–2049, 1980.
 - [43] K. Nanbu. Interactions between various direct simulation methods for solving the boltzmann equation. *J. of the Physical Society of Japan*, 52:3382–3388, 1983.
 - [44] T. Ohwada. Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the boltzmann equation for hard sphere molecules. *Phys. Fluid A*, 5:217 – 234, 1993.
 - [45] B. Perthame. *Introduction to the theory of random particle methods for Boltzmann equation*. RR-2218, INRIA, 1994.
 - [46] F. Coron B. Perthame. Numerical passage from kinetic to fluid equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28:26 – 42, 1991.
 - [47] C. Cercignani R. Illner M. Pulvirenti. *The mathematical Theory of dilute gases*. Springer Vorlage, 1994.
 - [48] M. Junk S. V. Raghurama Rao. A new discrete velocity method for navierstokes equations. *J. comp. Phys.*, 155(1):178–198, 1999.
 - [49] R. Waldecker L. Rempe-Gillen. *Primzahltests für Einsteiger*. Springer Spektrum, 2009.
 - [50] I. N. Larina V. A. Rykov and E. M. Shakov. Unsteady rarefied-gas flow between parallel plates. *Fluid Dynamics*, 32:289 – 295, 1997.
 - [51] T. Schreiber W. Wagner S. Rjasanow. Reduction of the number of particles in the stochastic weighted particle method for the boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, 145, 1998.
-

-
- [52] A. Palcowski J. Schneider. Existence, stability and convergence of solutions of discrete velocity models to the boltzmann equation. *J. Stat. Phys.*, 91(1):307–326, 1998.
- [53] F. Coquel F. Rogier J. Schneider. A deterministic method for solving the homogeneous boltzmann equation. *Rech. Aérospat.*, 3:1–10, 1992.
- [54] F. Rogier J. Schneider. A direct method for solving the boltzmann equation. *Transport Theory Statist. Phys.*, 23(1-3):313–338, 1994.
- [55] P. Michel J. Schneider. Approximation simultanée de réels par des nombres rationnels et noyau de collision de l’équation de boltzmann. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series I - Mathematics.*, 330(9):857–862, May 2000.
- [56] YL. Martin F. Rogier J. Schneider. Une méthode déterministe pour la résolution de l’équation de boltzmann inhomogène. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 314(6):483–487, 1992.
- [57] H. Sugimoto Y. Sone. Vacuum pump without a moving part driving by thermal edge flow. *AIP Conf. Proc. in Bari (Italy)*, pages 168–173, 2005.
- [58] Y. Sone. *Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications: (Kinetic Theory and Fluid Dynamics)*. Birkhäuser Boston, 2002.
- [59] Y. Sone. *Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications: (Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology)*. Birkhäuser Boston, 2007.
- [60] H. Neunzert J. Struckmeier. Particle methods of the boltzmann equation. *Acta Numerica*, 4:417–457, 1995.
- [61] F. Coron F. Golse C. Sulem. A classification of well-posed kinetic layers problems. *Comm. pure Appl. Math.*, 41(4):409–435, 1988.
- [62] A. Bobylev M.C. Vinerean. Construction of discrete kinetic models with given invariants. *J. Stat. Phys.*, 132(1):153–170, Apr. 2008.
- [63] D. J. Rader M. A. Gallis J. R. Torczynski W. Wagner. Direct simulation monte carlo convergence behavior of the hard-sphere-gas thermal conductivity for fourier heat flow. *Phys. Fluids , volume =*, 2006.
-

- [64] R. Illner W. Wagner. A random discrete velocity model and approximation of the boltzmann equation. *Journal of Statistical Physics*, 70(3-4):773 – 792, 1993.
- [65] S. Rjasanow W. Wagner. A generalized collision mechanism for stochastic particle schemes approximating boltzmann-type equations. *Computers and Mathematics with Applications*, 35(1), 1998.
- [66] S. Rjasanow W. Wagner. Stochastic weighted particle method, theory and numerical examples. *Bulletin of the Institute of Mathematics Academia*, 2, 2007.
- [67] M. Krook T. T. Wu. Formation of maxwellian tails. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 36:1107–1109, 1976.
- [68] G. Grosche V. Ziegler D. Ziegler. *Springer-Handbuch der Mathematik III*. Springer, 2013.